



ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Випуск № 3

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ТАРАСА
ШЕВЧЕНКА**

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича
КНУ

ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



16051JB

45 - чит. зал періодики та дисерц. 40.00

ВИПУСК №3 2010

**Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,
випуск №3, 2010**

Серія: фізико-математичні науки

З 1991 року серії вісників Київського університету "Математика і механіка", "Фізика", "Моделирование и оптимизация сложных систем" реорганізовано у "Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки". У віснику містяться результати нових досліджень у різних галузях математики, інформатики, механіки, фізики та радіофізики для наукових працівників, викладачів, аспірантів, інженерів і студентів. Друкується за рекомендаціями Вчених Рад фізичного, радіофізичного, механіко-математичного факультетів та факультету кібернетики.

Журнал "Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки" включено до переліку фахових видань ВАК України.

Редакційна колегія:

- Анісімов Анатолій Васильович, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор, **головний редактор**;
- Хусаїнов Денис Ях'євич, доктор фізико-математичних наук, професор, **заступник головного редактора, відповідальний за видання**;
- Адаменко Ірина Іванівна, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Акіменко Віталій Володимирович, доктор технічних наук, професор;
- Анісімов Ігор Олексійович, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Буй Дмитро Борисович, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;
- Булавін Леонід Анатолійович, академік НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Гаращенко Федір Георгійович, доктор технічних наук, професор;
- Данилов Вадим Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Єжов Станіслав Миколайович, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Кириченко Володимир Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Козаченко Юрій Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Левитський Сергій Михайлович, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Макара Володимир Арсенійович, член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Мелешко В'ячеслав Володимирович, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Перестюк Микола Олексійович, академік НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор;
- Скришевський Валерій Антонович, доктор фізико-математичних наук, професор.

Редакційний відділ:

- Анісімова Тетяна Харитонівна, **відповідальний секретар**;
- Безущак Оксана Омелянівна, bezusch@univ.kiev.ua;
- Мороз Костянтин Олександрович, morozko@univ.kiev.ua;
- Родіонова Тетяна Василівна, rodtv@univ.kiev.ua;
- Хмелюк Надія Кузьмівна, khmeluk@univ.kiev.ua;
- Сільвейструк Людмила Миколаївна, **технічний редактор**, slm-klm@ukr.net.

Адреса редакційної колегії:

Факультет кібернетики, Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
пр. Глушкова, 2, корп.6, 03680 Тел. (044) 259-01-49

ISBN 978-617-571-031-9

ISSN 1812-5409

ЗМІСТ

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

(The Proceedings of International Conference "Humboldt Cosmos: Science and Society")

Introduction	7
Bugaev K.A. What the surface tension of quark gluon bags can tell us about the history of the Universe?	8
Dyachenko S.M. On modular representations of some semigroups and representations of quivers with relations	11
Gayday A.V., Levandovskiy I.A., Shubina T.E. Mechanism of Influenza A M2 Ion-Channel Inhibition	16
Golovaschuk N.S. Skew symmetrical strongly nilpotent matrices of small dimensions	20
Grushka Ya.I. Translation-invariant Operators and Generalized Difference Variable Trace	24
Khripchenko N.S. Regular elements of nitary incidence rings	28
Kondratyev V.N. Burning the atomic nuclei	31
Kriukova G.V. The Lie algebra associated to an integer quadratic form	43
Maydanyuk S.P. Quantum method of determination of penetrability in FRW model with radiation	47
Melnyk I. Ultraproducts of d - MP-modules	53
Mel'nyk T.A., Popov A.V. Asymptotic solutions of boundary value problems in thin perforated domains with rapidly varying thickness and with different limiting dimensions	58
Mel'nyk T.A., Sivak O.A. Asymptotic expansion for the solution of an elliptic problem with boundary multi-phase interactions of the Dirichlet and Neumann types in a perforated domain	63
Molyboga V. Completeness of the rootvector system of the two-terms non-selfadjoint differential operators of an even order with periodic distribution potentials	68
Oliynyk A.S. Two-state automorphisms of rooted trees and free products of finite groups	74
Olkhovsky V.S. Time as a quantum observable, canonically conjugated to energy, and foundations of time analysis of quantum processes	77
Olkhovsky V.S., Dolinska M.E. To the modification of methods of nuclear chronometry in astrophysics and geophysics	82
Pantelyat M.G., Shulzhenko M.G. Numerical analysis of electromagnetic fields in 2D and 3D (industrial application: large synchronous turbogenerator rotors)	87
Pratsiovytyi M.V., Kotova O.V. On fractal properties of some Cantor-like sets related to Q-representation of real numbers	92
Rassadkina M.V. On a strong (min,max)-equivalence of posets with involution	97
Reva N.V. Continuous parameter dependence for solutions of the linear boundary-value problems for systems of ordinary differential equations in the Sobolev W-norm	100
Rozhenko N.A. Passive impedance systems and stochastic realizations of stationary processes	103
Shalaiko T.O., Shevchenko G.M. Multifractionality: a modern tool to model complex behaviour	107
Shechepanyuk G.V. On the exponential mixing property for the family of quantities that admit cluster expansions	112
Tylyshchak A.A. On maximal unipotent subgroups of the general linear group over commutative rings	115
Varbanets S.P. The weighting divisor function over $Z[i]$	118
Vasylenko N.M. On fractal properties of some Cantor-like sets generated by φ -representation of real numbers	121

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Безим'яна Е.М., Гуржій О.А. Хаотична адвекція розчинів електро-осмотичними течіями в мікроканалах	127
Добродзій Т.В. Метод усереднення в задачах оптимального керування на півосі	131
Ковальчук Б.П. Вплив рідинного наповнення на рух циліндричного резервуару на маятниковому підвісі	137
Курилко О.Б. Локальна структура двовимірної течії Стокса поблизу кута прямокутної порожнини	141

Лучко В.М. Задача Коші для параболічного псевдодиференціального рівняння вищого порядку з імпульсним впливом	145
Острик В.І., Щокотова О.М. Ковзний контакт жорсткого диска з пружним клином	149
Романенко В.М. Апроксимація обмежених розв'язків різницевих рівнянь старших порядків	153
Чайковський А.В. Періодичні розв'язки диференціальних рівнянь з G-секторіальним операторним коефіцієнтом	157

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Анікушин А.В. Узагальнена розв'язність лінійних інтегро-диференціальних рівнянь еліптичного типу	163
Горобець О.Ю., Потьомкін М.М. Моделювання обертального руху мікрочастинки під дією зовнішнього осцилюючого магнітного поля	169
Джалладова І.А., Іванов А.Ф., Свіщук А.В., Хусаїнов Д.Я. Стійкість та оцінки збіжності розв'язків лінійного стохастичного рівняння нейтрального типу	173
Кулян В.Р., Юнькова О.О., Рутицька В.В. Про моделювання динаміки інвестицій	179
Машенко С.О., Чуба Л.В. Узагальнення рівноваги Штакельберга на основі принципу індивідуальної оптимальності	183
Потієнко М.В. Структурна модель процесів короткотривалої пам'яті людини	189
Савкіна М.Ю. L1 – оцінка параметрів моделі нелінійної сплайнової регресії	193
Чечельницький О.А. Спільна дифузійна апроксимація тандему систем обслуговування	199
Чухрай Л.В. Мінімаксне оцінювання крайових умов для сингулярного одновимірного параболічного рівняння в умовах невизначеності	205

РАДІОФІЗИКА

Бех І.І., Вербицька О.В., Ільченко В.В., Лушкін О.Є., Нагула П.О. Особливості механізму впливу електричного поля на властивості металевопористих емітерів	211
Борецький В.Ф., Веклич А.М., Затірка О.І., Телега В.М. Властивості плазми електричної дуги, що горить у потоці аргону між мідними електродами	217
Коротков П.А., Кириленко Є.К., Гальченко С.М. Експериментальне визначення коефіцієнту підвищення чутливості рентгенофлуоресцентного аналізу біопроб після термічного експрес-озолення	221
Лисоченко С.В., Чирчик С.В. Метод визначення рекомбінаційних параметрів в технологічних пластинах Si	229

СУЧАСНА ФІЗИКА

Адаменко І.І., Григор'єв А.М., Кузовков Ю.Г. Вплив форми молекули на пружні властивості рідин. (Тверді гантелі, еліпсоїди обертання та сфероциліндри)	235
Адаменко І.І., Королович В.Ф., Архипов С.О., Мороз К.О. Молекулярна структура води у вуглецевих нанотрубках	241
Булавін Л.А., Загородня О.А., Перепелиця С.М., Кравцова Т.А. Дослідження гомогенності систем вода - ДНК	249
Горкавенко Т.В., Зубкова С.М., Макра В.А., Русіна Л.М., Смедяньський О.В. Електронні властивості поверхні (111) в AlB5 та AlB6 кристалах	251
Захарченко І.В., Кошеленко В.П., Крилов О.В., Неділько С.Г. Експериментальне визначення внутрішніх втрат твердотілого імпульсного лазера	261
Копань В.С., Хуторянська Н.В., Копань Ю.В. Термоелектричний адсорбційний ефект в металевих і вуглецевих порошках	265
Лисов В.І., Цареградська Т.Л., Турков О.В., Саєнко Г.В., Абібугаєва Л.Ф. Дослідження впливу термообробки на температурно-часову стабільність аморфних сплавів	269
Онанко А.П. Вплив опромінення на вказівну поверхню пружно-непружного тіла сплаву Ag _{0.8} Zn _{0.2}	273
Храпійчук Г.В., Чалий О.В., Нурищенко Н.Є. Бародифузійні явища при активному транспорті іонів Na ⁺ і K ⁺ через клітинну мембрану	277

**АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРИЯ ТА
ТЕОРИЯ ІМОВІРНОСТЕЙ**
(The Proceedings of International
Conference “Humboldt Cosmos:
Science and Society”)

Introduction

"The Starry Sky Above Me and the Moral Law Within Me"

Immanuel Kant

The International Conference **"Humboldt Cosmos: Science and Society"** ($H_C S^2$ -Kiev2009, www.humboldt.org.ua/kolleg) belongs to the Humboldt-Kolleg series that is kindly sponsored by the Alexander von Humboldt Foundation. This event was organized in Kiev on 19-22 November, 2009 by the Humboldt-Club Ukraine in close cooperation with the German Embassy in Kiev at the honorary patronage by the Ambassador, Dr. Hans Juergen Heimsoeth, German Embassy, Kiev, Ukraine, the honorary scientific patronage: by Prof. Dr. Yaroslav S. Yatskiv – Main Astronomical Observatory of Ukrainian National Academy of Science, President of the Ukrainian Astronomical Association, and Prof. Dr. Valeryi I. Grigoruk – ViceRector of the Taras Shevchenko National University of Kiev, and contributed to "the Days of German Science and Research in the Ukraine 2009". In addition, the Ukrainian National Academy of Science, and the Taras Shevchenko National University of Kiev supported the Conference $H_C S^2$ -Kiev2009.

The following main topics: Cosmology & astrophysics experience in S^2 – science&society; Mathematical & analytical method implications in S^2 – science&society; Geopolitics & economy in Society, did not limit the Kolleg scope addressing, thereby, multidisciplinary issues of various aspects of Science and Society, according to the spirit and traditions of the Humboldt meetings. Therefore, the Club continues on the series of recent Humboldt-Kollegs organized by the Humboldt-Clubs around the World and promoting, in particular, young researchers.

In the International Year of Astronomy 2009 (<http://www.astronomy2009.org/>) particular attention was, naturally, devoted to Astronomy, Astrophysics and Cosmology; especially, their impact in modern science, technology, economy, philosophy, theology, religion and/or Society. The childhood from Immanuel Kant (cited above) is brought, thereby, by the International Astronomical Union and UNESCO to a new global level in understanding and exploring by the Society a place in the Universe. Respectively, the invited plenary talks at the first day of the Kolleg opening have discussed the modern status of

monitoring problems of the Space, the Solar System and the Earth with the use of the Earth based and the Cosmic Satellite based Observatories emphasizing, thereby, the importance of multipoint measurements in space plasma to reveal the multiscale MHD/kinetic nature of nonlinear physical processes controlling the key elements in the chain of solar-terrestrial relations (Prof. Dr. Lev M. Zelenyi, Space Research Institute (IKI) of Russian Academy of Sciences), as well as the history of Astronomical observations their place and role in society development (Prof. Dr. Bohdan I. Hnatyk, the Astronomical Observatory of the Taras Shevchenko National University of Kiev). The movies of the plenary talks can be taken from the Conference Web page

(www.humboldt.org.ua/kolleg) or requested from Organizers. The ideas, methods and approaches of Alexander von Humboldt were emphasized to be quite useful and even still advanced in modern science, monitoring and technology. It is worthy to mention in this respect the Alexander von Humboldt Commemorative Year 2009. Therefore, several talks at the Kolleg have discussed the legacy of Alexander von Humboldt in more details, especially, the period in Russia.

The Conference level ensures the quality of contributions. These Proceedings represent some selected papers from the scientific program of the parallel Half Plenary Sessions addressing I- the composition, the main energy production mechanisms in the Universe and the energy sources fundamentals at the Earth based environment as well as II- various mathematical and analytical methods.

Kondratyev Vladimir
Kolleg chairman

УДК 539.12

Кирило О. Бугаєв, старший наук. співробітник

Що поверхневий натяг кварк-глюонних мішків може сказати нам про історію Всесвіту?

Розглянуто новий феноменологічний механізм кольорового конфайнменту. Завдяки цьому знайдено зв'язок між поверхневим натягом кварк-глюонних мішків і натягом струни, що з'єднує кварк-антикваркову пару. Це дозволяє показати, що за високих температур поверхневий натяг цих мішків є від'ємним.

Ключові слова: конфайнмент, кварк-глюонний мішок, поверхневий натяг, натяг струни.

E-mail: bugaev@th.physik.uni-frankfurt.de

Статтю представив к.ф.-м.н. Кондратьєв В.М.

1. The surface tension of quark gluon (QG) bags.

The crucial importance of the surface tension of QG bags for the cosmological phase transition in the early Universe was realized long ago [1]. Its importance for the cross-over (continuous transition) existence at high temperatures and low baryonic densities was figured out recently [2]. However, the value of the surface tension coefficient of QG bags is known only from some effective models which do not agree with each other. Here we present an approach that allows one to express the string tension in terms of the bag surface tension and thermal pressure and, consequently, to estimate the bag characteristics using the lattice quantum chromodynamics (QCD) data. Also below we will demonstrate that the surface tension coefficient of QG bags is amazingly negative at the cross-over region.

The most clear picture of the confinement is based on the confining string model: at low temperature T and large separation distance L the free energy of static quark-antiquark pair is linear in L , i.e. $F_{st}(T, L) \approx \sigma_{st}(T) L$. For low temperatures the string tension coefficient $\sigma_{st}(T)$ is positive and this prevents the separation of quark from antiquark, while at high temperatures the vanishing value of $\sigma_{st}(T)$ leads to their deconfinement. Since the fluctuations of color string describe a cylinder with the mean radius R , it is instructive to consider such a cylinder as a QG bag with the temperature dependent surface tension $\sigma_{surf}(T)$. Then equating the free

Kyrill A. Bugaev, senior scientific researcher

What the surface tension of quark gluon bags can tell us about the history of the Universe?

Here we consider the novel phenomenological mechanism for the color confinement. Using it we found out the relation between the surface tension of quark gluon bags and the tension of the string confining static quark-antiquark pair. This allows us to show that at high temperatures the surface tension of these bags is negative

Key Words: confinement, quark gluon bag, surface tension, string tension.

energy of elongated cylindrical bag of radius R ($R \ll L$) and zero baryonic charge

$$F_{cyl} = \pi R L [2\sigma_{surf}(T) - p_v(T)R] + T\tau \ln \left[\frac{\pi R^2 L}{V_0} \right] \quad (1)$$

to that one of the string, one obtains the relation between the string tension and the surface tension

$$\sigma_{st}(T) = \pi R [2\sigma_{surf}(T) - p_v(T)R] + \frac{T\tau}{L} \ln \left[\frac{\pi R^2 L}{V_0} \right]. \quad (2)$$

In Eqs. (1) and (2) $p_v(T)$ denotes the thermal pressure inside a bag, while τ and V_0 are some constants ($V_0 \approx 1 \text{ fm}^3$) [2]. Eq. (1) contains the bulk part of free energy which is proportional to the cylinder volume $\pi R^2 L$, the surface part of free energy (proportional to cylinder surface $2\pi R L$) and the Fisher term which is proportional to the index $\tau > 1$ [2]. Clearly, in thermodynamic limit $L \gg R$ the last term on the right hand side of (2) is negligible.

Equating these two free energies we match an ensemble of all string shapes of fixed L to a mean elongated cylinder, which according to the original Fisher idea [3], represents a sum of all surface deformations of a bag with a given mean volume. In the limit $L \gg R$ Eq. (2) determines the T -dependence of the surface tension of bags as

$$\sigma_{surf}(T) = \frac{\sigma_{st}(T)}{2\pi R} + \frac{1}{2} p_v(T)R. \quad (3)$$

From Eq. (3) one obtains the temperature dependence of the string radius

$$R^{\pm} = \frac{\left[\sigma_{surf}(T) \pm \sqrt{\sigma_{surf}^2(T) - \frac{p_v(T)\sigma_{str}(T)}{\pi}} \right]}{p_v(T)}, \quad (4)$$

if the temperature dependences of $\sigma_{str}(T)$, $\sigma_{surf}(T)$ and $p_v(T)$ are known. Eq. (4) clearly demonstrates that for a confining string, i.e. for $\sigma_{str}(T) > 0$, the bag surface tension can vanish only and only for $p_v(T) \leq 0$, i.e. only for negative or zero values of thermal pressure! The latter follows from the R -independent inequality

$$\sigma_{surf}(T)^2 \geq \frac{p_v(T)\sigma_{str}(T)}{\pi}. \quad (5)$$

Substituting $\sigma_{surf}(T) \rightarrow 0$ into (3), one obtains

$$R^-|_{\sigma_{surf}(T) \rightarrow 0} \rightarrow \sqrt{\frac{\sigma_{str}(T)}{-\pi p_v(T)}}, \quad (6)$$

which is real for $p_v(T)\sigma_{str}(T) \leq 0$.

Eq. (3) opens a principally new possibility to determine the QG bag surface tension directly from the lattice QCD data. Unfortunately, up to now there are no the lattice QCD simulations, which simultaneously measured all three quantities entering the right hand side of Eq. (3). Nevertheless, using (3) it is possible to roughly estimate the surface tension at $T = 0$. Taking the typical value of the bag model pressure as $p_v(T=0) = -(0.25)^4 \text{ GeV}^4$, $R = 0.5 \text{ fm}$ and $\sigma_{str}(T=0) = (0.42)^2 \text{ GeV}^2$ [4], from (3) one finds $\sigma_{surf}(T=0) \approx (0.183)^3 \text{ GeV}^3 = 157.4 \text{ MeV/fm}^2$. This estimate is larger than the ones which are familiar to the astrophysics community, but it is necessary to emphasize that the above result is based on the conservative parameter values in Eq. (3). If we take smaller radius R and smaller value for the bag constant, then the surface tension at vanishing temperature would be even larger.

2. Entropy density of the cylindrical QG bag.

The above results allow us to investigate the QG bag surface tension near the cross-over to QG plasma. For this purpose we need to assume a certain relation between at least two quantities in Eq. (3). The lattice QCD shows that for fixed values of L the string tension behaves ($\omega_k = \text{const} > 0$)

$$\sigma_{str}(T)R^k \rightarrow \omega_k > 0, \quad (7)$$

when the temperature approaches the cross-over value T_c from below, i.e. for $T \rightarrow T_c - 0$. Such a behavior with $k=2$ in Eq. (7) is observed in 3+1-dimensional lattice QCD simulations [5]. It can be understood as follows: at low T the string energy is almost equal to its free energy and both are proportional to the separation distance L ; as the

temperature increases, the flux tube starts to oscillate and its length exceeds the separation distance L ; eventually at $T = T_c$ the flux tube travels all over the available space before ending on the color charges.

Here we consider a wider range for the power $k > 0$ in order to find some general restrictions between the parameters of our model.

A few words should be said about the effect of outer baryonic charge in the system of quark-antiquark pairs (with zero net baryonic charge). It can be accounted for by the dependence of string melting temperature T_c on the baryonic chemical potential μ_b . Apparently it leads to the temperature T_c decreasing as a function of μ_b as expected by the QCD phenomenology [6]. Therefore, in what follows it is also assumed that Eq. (7) remains valid for the non-zero values of μ_b .

Clearly, the surface tension coefficient can be affected by $\mu_b > 0$ as well, but the main result of Eq. (5) remains obviously valid. From Eq. (3) one can also calculate the thermal pressure for $L \gg R$ as

$$p_v(T) = 2 \frac{\sigma_{surf}(T)}{R} - \frac{\sigma_{str}(T)}{\pi R^2} \rightarrow \left[\frac{\sigma_{str}}{\omega_k} \right]^{\frac{1}{k}} \left[2\sigma_{surf} - \frac{\omega_k}{\pi} \left[\frac{\sigma_{str}}{\omega_k} \right]^{\frac{k+1}{k}} \right], \quad (8)$$

and obtain the total pressure inside the QG bag

$$p_{tot} = p_v(T) - \frac{\sigma_{surf}(T)}{R} \equiv \frac{\sigma_{surf}(T)}{R} - \frac{\sigma_{str}}{\pi R^2} \rightarrow \left[\frac{\sigma_{str}}{\omega_k} \right]^{\frac{1}{k}} \left[\sigma_{surf} - \frac{\omega_k}{\pi} \left[\frac{\sigma_{str}}{\omega_k} \right]^{\frac{k+1}{k}} \right], \quad (9)$$

and the entropy density

$$s_{tot} = \frac{\partial p_{tot}}{\partial T} \rightarrow \frac{1}{k\sigma_{str}} \left[\frac{\sigma_{str}}{\omega_k} \right]^{\frac{1}{k}} \frac{\partial \sigma_{str}}{\partial T} \sigma_{surf} + \left[\frac{\sigma_{str}}{\omega_k} \right]^{\frac{1}{k}} \frac{\partial \sigma_{surf}}{\partial T} - \frac{k+2}{\pi k} \left[\frac{\sigma_{str}}{\omega_k} \right]^{\frac{2}{k}} \frac{\partial \sigma_{str}}{\partial T}. \quad (10)$$

The mechanical stability of the cylindrical bag means an equality of the total bag pressure (9) to the outer pressure, but the thermodynamic stability requires positive value for the entropy density (10). To quantify the latter we adopt the following parameterization of the string tension for $T \rightarrow T_c - 0$

$$\sigma_{str}(T) = \sigma_{str}^0 t^v, \text{ with } t \equiv \frac{T_c - T}{T_c} \rightarrow +0, \quad (11)$$

where $\sigma_{str}^0 > 0$ and $v > 0$ are some constants. Then the total entropy density of the cylindrical bag becomes

$$s_{str} \rightarrow \left[\frac{\sigma_{str}^0 t^\nu}{\omega_k} \right]^{\frac{1}{k}} \left\{ \frac{\nu}{k T_{tr}} \frac{\sigma_{surf}}{t} + \frac{\partial \sigma_{surf}}{\partial T} \right\} + \frac{(k+2)\nu}{\pi k} \left[\frac{\sigma_{str}^0 t^\nu}{\omega_k} \right]^{\frac{2}{k}} \frac{\sigma_{str}^0 t^{\nu-1}}{T_{tr}}, \quad (12)$$

The model of quark gluon bag with surface tension [2] predicts that everywhere at the cross-over line, except for the (tri)critical endpoint, the surface tension coefficient σ_{surf} is non-zero and its derivative is finite at $t \rightarrow +0$. Remembering this requirement one finds from Eq. (12) that its first term on the right hand side dominates and, hence, we get

$$s_{str} \rightarrow - \left[\frac{\sigma_{str}^0}{\omega_k} \right]^{\frac{1}{k}} \frac{\nu}{k T_{tr}} \sigma_{surf}(T_{tr}) t^{\frac{\nu}{k}-1} > 0. \quad (13)$$

The latter means that at $T \rightarrow T_{tr} - 0$ the surface tension coefficient must be negative $\sigma_{surf}(T_{tr}) < 0$. Actually, this result is not very surprising to us since the calculations of surface partitions for physical clusters [7] and the model of quark gluon bags with surface tension [2] predict that at low baryonic densities the deconfining phase transition degenerates into a cross-over just because the surface tension coefficient of large bags becomes negative in this region. Eq. (13) clearly shows that the color string model shares the possibility of negative values of bag surface tension coefficient in the cross-over region.

3. Conclusions.

Here we discuss the novel approach to the bag phenomenology of deconfinement using the quark gluon bag model with surface tension [2]. An analysis of the free energies of cylindrical bag and confining color string allows us to find out rather general expression connecting the string tension with the bag surface tension coefficient and thermal pressure. In principle, this relation makes it possible to estimate the bag surface tension directly from the LQCD measurements. We use the derived relation to estimate the surface tension of QG bags at zero temperature. For the standard values of thermal pressure as given by the equation of state of bag model we found out that $\sigma_{surf}(T=0) \approx (0.183)^3 \text{ GeV}^3 \approx 157.4 \text{ MeV/fm}^2$, i.e. surprisingly it is rather large compared to the estimates obtained in the other phenomenological models. It is argued that such an estimate is the lower bound for the QG bag surface tension at $T = 0$. This fact is important for the cosmology because in one of the scenarios [1] of the early Universe expansion the quark matter may survive the 'boiling' period of its history, if $\sigma_{surf} > (0.178)^3 \text{ GeV}^3$ [8]. At first glance it seems that our estimates support the idea of the quark matter

survival till the present days, but, as we showed above, at high temperatures including the boiling one the surface tension coefficient is negative, i.e. it is essentially smaller than the critical value of Ref. [8]. Also very recently it was shown [9] that even at zero temperature the QG bags of mass M have rather large width $\Gamma \approx \Gamma_0 \sqrt{M/M_0}$ (here $\Gamma_0 \approx 400-600 \text{ MeV}$ and $M_0 \approx 2.5 \text{ GeV}$), while at higher temperatures the width gets larger. Therefore, the negative surface tension of QG bags and their very short life time prevent the quark matter survival to the present days.

The second important finding presented here is that at temperatures which are close to that one of the cross-over the surface tension coefficient of QG bags is negative. We would like to stress that there is nothing wrong with the negative values of the surface tension coefficient since it is just the surface free energy $F = E - TS$, which is a function of surface energy E , temperature T and surface entropy S . The negative value of the free energy at high temperatures means that the surface entropy S of the string is larger than E/T . Exactly solvable model [7] for the surface partitions of physical clusters which consist of the constituents of finite size explains that negative value of the surface free energy signals about the dominance of the surfaces of complicated shapes.

References

1. Witten E. Phys. Rev. D (1984) 30, p.272.
2. Bugaev K.A. Phys. Rev. C (2007) 76, p.014903.
3. Fisher M.E. Physics (1967) 3, p.255.
4. Mocsy A. and Petreczky P. PoS LAT2007 (2007) 216.
5. Gubarev F.V. arXiv:hep-lat:0812.4488.
6. Shuryak E.V. Prog. Part. Nucl. Phys. (2009) 62, p.48.
7. Bugaev K.A., Phair L. and Elliott J.B., Phys. Rev. E (2005) 72, p.047106.
8. Alcock C. and Olinto A. Phys. Rev. D (1989) 39, p.1233.
9. Bugaev K.A., Petrov V.K. and Zinovjev G.M. Phys. Rev. C (2009) 79, p.054913.

Надійшла до редакції 30.04.2010

УДК 512.54

С.М. Дяченко, к.ф.-м.н.

Модулярні зображення деяких
напівгруп та зображення сагайдаків зі
співвідношеннями

У роботі вивчається зображувальний
тип напівгруп Рісса над циклічною групою
другого порядку у модулярному випадку. Та-
кож вивчається зв'язок із зображенням са-
гайдаків із співвідношеннями.

Ключові слова: напівгрупа Рісса, Моріта
еквівалентний, зображення, ручна задача.

E-mail: smdyachenko@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

In this article we consider a Rees semigroups and
its representations. Let G be a group. Denote
 $G_0 = G \cup \{0\}$. So G_0 is a semigroup with zero.
Let B be $n \times m$ matrix with elements from G_0
such that in any row and column there is at least
one nonzero element. Let g be an element of the G
and $1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n$. Denote by $(g)_{ij}$ a $m \times n$
matrix which have g on the position (i, j) and zeros
on the other positions. Denote by $\mathcal{R}(G, B)$ the set
of all such matrices together with zero matrix and
define a multiplication $"*"$:

$$(g)_{ij} * (g')_{i'j'} = (g)_{ij} \cdot B \cdot (g')_{i'j'}$$

where $"\cdot"$ denote the usual multiplication of matrices.
The set $\mathcal{R}(G, B)$ together with multiplication
 $"*"$ is called *Rees semigroup over the group G with
sandwich matrix B* .

Ponizovskii [1] described all Rees semigroups
of finite representation type over field F in the
situation when $\text{char } F$ and order of group G is
coprime.

In this article $G = C_2 = \{e, a | a^2 = e\}$ —
the cyclic group of order two. We are interested in
the representation type in modular case so in the
article the base field F has characteristic two.

We denote $\mathcal{R}(B) = \mathcal{R}(C_2, B)$.

The problem of classifying representations of
a semigroup S is equivalent to the problem of

S.M. Dyachenko, PhD.

On modular representations of some
semigroups and representations of quivers
with relations

Representation type of Rees semigroup over
a cyclic group of order two in modular case is
studied. Problem is reduced to representation of
quivers.

Key Words: Rees semigroup, Morita equiva-
lent, representation, tame problem.

classifying representations of its semigroup algebra
 $F[S]$. Denote by $\mathcal{M}(B) = F[\mathcal{R}(B)]$. It is easy to
see that $\mathcal{M}(B)$ is algebra of all $m \times n$ matrices
over the group algebra $F[C_2]$ with multiplication
 $M_1 * M_2 = M_1 B M_2$.

So we are interested in representation type of
algebra $\mathcal{M}(B)$ over a field F of characteristic two.

2 Simplifying the matrix

We want to construct another algebra $\mathcal{M}(D)$
with diagonal matrix D which have the same
representation type as $\mathcal{M}(B)$.

Proposition 1. *If there exists an invertible matrices $S \in M_n(F[C_2])$ and $T \in M_m(F[C_2])$ such that $B' = SBT$ then algebras $\mathcal{M}(B)$ and $\mathcal{M}(B')$ are isomorphic.*

Proof. The isomorphism is given by following
rules:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(B) \ni M &\mapsto T^{-1} M S^{-1} \in \mathcal{M}(B'), \\ \mathcal{M}(B') \ni M' &\mapsto T M' S \in \mathcal{M}(B). \end{aligned}$$

□

It is easy to prove by induction that any
matrix B over $C_2 \cup \{0\}$ one can reduce by
elementary transformations of rows and columns
over F_2 to a matrix D' which have elements 0,
 e and $e + a$ on the main diagonal and another
elements zero. Since $B \neq 0$ matrix D' have at

least one element e . So we have $\mathcal{M}(B) \simeq \mathcal{M}(D')$ where D' is following block matrix

$$D' = \begin{pmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$E = \text{diag}(e, \dots, e)$, $A = \text{diag}(e + a, \dots, e + a)$ – diagonal matrices.

Proposition 2. $\mathcal{M}(D')$ is Morita equivalent to an algebra $\mathcal{M}(D)$ where D have on the main diagonal unique element e , elements $e + a$ and 0. Matrix D can be obtained from D' by replacing the block E by 1×1 block (e) .

Proof. To prove this we write every matrix $X \in \mathcal{M}(D')$ in the block form respectively to blocks of matrix D' :

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{21} & X_{22} & X_{23} \\ X_{31} & X_{32} & X_{33} \end{pmatrix}.$$

Then we consider the algebra with attached unit $\mathcal{A} = \mathcal{M}(D') \oplus F\varepsilon$. It is easy to show that $\text{rad}\mathcal{A}$ consists of all matrices X with $X_{11} = (a + e)H$, where H is matrix over F . Then

$$\mathcal{A} \simeq \text{rad}\mathcal{A} \oplus (M_k(F) \oplus F\varepsilon),$$

where k is dimension of block E . All nonequivalent idempotents of algebra $M_k(F) \oplus F\varepsilon$ is e_{11} and $e = \varepsilon + e_{11} + \dots + e_{kk}$, where e_{ij} – standard basis of matrix algebra. Denote by $I = e_{11} + e$. It is well known fact that algebra $\mathcal{A}$ and IAI are Morita equivalent. Matrix IXI can be obtained if we replace 2-nd, ..., k -th rows and columns of matrix X by zeros. So $IAI \simeq \mathcal{M}(D) \oplus F\varepsilon$. $\square$

Corollary 1. Algebras $\mathcal{M}(D')$ and $\mathcal{M}(D)$ have the same representation type.

3 Main result

In this article we prove theorem which describes all Rees semigroup of finite and tame type.

Theorem. 1. Algebra $\mathcal{M}(B)$ has finite representation type if and only if after simplifying matrix B has following form:

$$(e), (e \ 0), \begin{pmatrix} e \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e + a \end{pmatrix}$$

2. Algebra $\mathcal{M}(B)$ has tame representation type if and only if after simplifying matrix B has following form:

$$\begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & e + a & 0 \\ 0 & 0 & e + a \end{pmatrix}$$

To prove this theorem we consider two cases: first of all A is empty matrix and then if nonempty.

4 A is empty matrix

The matrix D has unique nonzero entry e on the position $(1, 1)$. Denote by $\mathcal{E}_{n,m}$ such $n \times m$ matrix. First of all we prove that $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})$ is wild if $n > 2$ or $m > 2$.

Proposition 3. Algebras $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{3,1})$ and $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,3})$ are wild.

Proof. We prove proposition for $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{3,1})$, for $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,3})$ proof is similar.

Algebra $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{3,1})$ have basis $e_1 = (e, 0, 0)$, $e_2 = (0, e, 0)$, $e_3 = (0, 0, e)$, $a_1 = (a, 0, 0)$, $a_2 = (0, a, 0)$, $a_3 = (0, 0, a)$. It is easy to see that e_i is idempotent, $a_2 = a_1 * e_2$, $a_3 = a_1 * e_3$, $e_1 = a_1 * a_1$ so algebra is generated by elements $\{a_1, e_2, e_3\}$.

Let us consider representation

$$M_{a_1} = \begin{pmatrix} E & E & 0 \\ 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_{e_2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{e_3}(X, Y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & X \\ 0 & 0 & Y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

It is easy to verify that two representations $M_{a_1}, M_{e_2}, M_{e_3}(X, Y)$ and $M_{a_1}, M_{e_2}, M_{e_3}(X', Y')$ are equivalent if and only if the pair of matrices (X, Y) and (X', Y') are similar i. e. there exist an invertible matrix S such that that $S^{-1}XS = X'$, $S^{-1}YS = Y'$. So this matrix problem is wild.

□

Proposition 4. Algebras $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m-1})$ and $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n-1,m})$ are factor algebras of $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})$, $m, n > 1$

Доказання. Consider an algebra $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})$. It has basis $e_{ij}, a_{ij}, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$, e_{ij} is matrix with unique nonzero entry e on the position (i, j) , a_{ij} is matrix with unique nonzero entry a on the position (i, j) . The linear subspace

$$I = \langle e_{m1}, \dots, e_{mn}, a_{m1}, \dots, a_{mn} \rangle$$

is ideal of $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})$. Really $\mathcal{E}_{n,m}e_{mj} = 0$ then $x * e_{mj} = 0$ for all $x \in \mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})$, matrix e_{mj} has nonzero elements only in m -th row so matrix $e_{mj} * x$ has nonzero elements only in m -th row. The same is true for a_{mj} . So I is ideal. It is easy to see that $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})/I \simeq \mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m-1})$. Similarly for ideal

$$J = \langle e_{1n}, \dots, e_{mn}, a_{1n}, \dots, a_{mn} \rangle,$$

$$\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})/J \simeq \mathcal{M}(\mathcal{E}_{n-1,m}).$$

□

Corollary 2. $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})$ is wild if $\max\{m, n\} > 2$.

Proof. It is well known fact that algebra which have wild factor also wild. If $n > 2$ ($m > 2$) then $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,1})$ ($\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,3})$) is factor of $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{n,m})$.

□

So it remains to consider situation when $n, m \leq 2$. There is four matrices $\mathcal{E}_{1,1}, \mathcal{E}_{2,1}, \mathcal{E}_{1,2}, \mathcal{E}_{2,2}$.

Proposition 5. Algebras $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,1})$, $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{2,1})$, $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,2})$ are of finite type. Algebra $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{2,2})$ is of tame type.

Proof. Algebra $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,1})$ is simply group algebra for the group C_2 , so is of finite type.

Let us consider algebra $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{2,1})$ it have basis e_1, e_2, a_1, a_2 (see proposition 3) and $a_1^2 = e_1$, $a_2 = a_1 * e_2$. So

$$\mathcal{M}(\mathcal{E}_{2,1}) = \langle a_1, e_2 \mid a_1^3 = a_1, e_2^2 = 0, e_2 * a_1 = 0 \rangle.$$

Consider some representation A_1, E_2 of this algebra. Let us reduce first of all the matrix $E_1 = A_1^2$. We have $E_1^2 = E_1$ so E_1 we can reduce to the form

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Then due to $e_1 a_1 = a_1 e_1 = a_1$, $e_1 e_2 = e_2$, $e_2 e_1 = 0$ matrices A_1 and E_2 will have respectively next form

$$\begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & X \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Since $A_1^2 = E_1$, $U^2 = E$. Let us reduce matrix X to the form

$$\begin{pmatrix} 0 & E \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

then for the matrix U we obtain problem of classification an operator U such that $U^2 = 0$ in vector space graded by poset $S = \{1 < 2\}$ (see [2]). This problem is of finite type [2, Theorem 1].

The proof for the algebra $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{1,2})$ is similar.

Let us consider the algebra $\mathcal{M}(\mathcal{E}_{2,2})$ it consists of 2×2 matrices. So it have basis $\{e_{11}, e_{12}, e_{21}, e_{22}, a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}\}$, where matrices e_{ij} , a_{ij} has unique nonzero element e , a respectively on the position (i, j) . Since $e_{22} = e_{21} * e_{12}$, $a_{12} = a_{11} * e_{12}$, $a_{21} = e_{21} * a_{11}$, $a_{22} = e_{21} * a_{11} * e_{12}$ the system of generators for this algebra is $\{e_{11}, e_{12}, e_{21}, a_{11}\}$.

Let us consider a representation of this algebra $E_{11}, E_{12}, E_{21}, A_{11}$. We have $E_{11}^2 = E_{11}$ so E_{11} we can reduce to the form

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Then due to $e_{11}a_{11} = a_{11}e_{11} = a_{11}$, $e_{11}e_{12} = e_{12}$, $e_{12}e_{11} = 0$, $e_{11}e_{21} = 0$, $e_{21}e_{11} = e_{21}$ matrices A_{11} , E_{12} and E_{21} have respectively next form

$$\begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & X \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ Y & 0 \end{pmatrix}.$$

We have $A_{11}^2 = E_{11} \Rightarrow U^2 = E$, $e_{12} * e_{21} = 0 \Rightarrow XY = 0$.

Let us reduce matrices X and Y to the following form

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

then for the matrix U we obtain problem of classification an operator U such that $U^2 = 0$ in vector

space graded by poset $S = \{1 < 2 < 4, 1 < 3 < 4\}$. This problem is of tame type [2, Theorem 2].

□

5. A is nonempty matrix

In this case we reduce the problem to representations of quivers and use result [3].

Let us consider, first of all situation when sandwich matrix D has no zero blocks

$$D = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}.$$

Where A is diagonal matrix which have $e + a$ on its diagonal. Let us denote by $D(A, r)$ such matrix (r is dimension of matrix A).

Proposition 6. *Algebra $\mathcal{M}(D(A, r))$ is wild for $r \geq 2$*

Proof. Let us consider an algebra $\mathcal{M}(D(A, r))$. It has basis $\{e_{ij}, a_{ij} \mid 1 \leq i, j \leq r + 1\}$ where matrices e_{ij}, a_{ij} has unique nonzero element e, a respectively on the position (i, j) . This algebra has system of generators $\{e_{i1}, e_{1i} \mid 1 \leq i \leq r + 1\}$ because $e_{ij} = e_{i1} * e_{1j}$, $a_{ij} = e_{i2} * e_{2j} + e_{ij}$.

Let us construct a quiver for the algebra $\mathcal{M}(D(A, r))$. Since it has no unit we attach unit to this algebra and consider an algebra

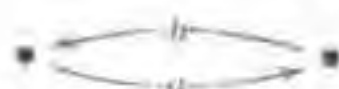
$$\mathcal{A} = \mathcal{M}(D(A, r)) \oplus F\varepsilon.$$

It has two idempotents $e_1 = e_{11}$ and $e_2 = \varepsilon - e_{11}$ so the quiver of this algebra will have two points p_1 and p_2 corresponding to idempotents. Arrows e_{i1} , $2 \leq i \leq r + 1$ from p_1 to p_2 and arrows e_{1i} , $2 \leq i \leq r + 1$ from p_2 to p_1 . If $r \geq 3$ then algebra is wild due to [3, Theorem 2, W_1].

□

Proposition 7. *Algebra $\mathcal{M}(D(A, 1))$ is of finite type. Algebra $\mathcal{M}(D(A, 2))$ is of tame type.*

Proof. Quiver for the algebra $\mathcal{M}(D(A, 1))$ has following form



with $abab = 0$. If we consider this quiver without relations then it is tame quiver, so with relation it becomes finite type quiver.

Quiver for the algebra $\mathcal{M}(D(A, 2))$ has following form



where $a_1 = e_{12}$, $a_2 = e_{13}$, $b_1 = e_{31}$, $b_2 = e_{21}$ with relations

$$\begin{aligned} a_1 b_2 a_1 b_2 &= 0; & a_2 b_1 a_2 b_1 &= 0; \\ a_1 b_1 &= 0; & b_1 a_1 &= 0; \\ a_2 b_2 &= 0; & b_2 a_2 &= 0. \end{aligned}$$

This quiver is of type T_3 — quiver with relations $\{a_1 b_1 + \sigma_1, a_2 b_2 + \sigma_2, (x_1 b_1 + x_2 b_2)(y_1 a_1 + y_2 a_2) + \sigma_3, (x_3 b_1 + x_4 b_2)(y_3 a_1 + y_4 a_2) + \sigma_4, \sigma_5, \dots, \sigma_s\}$ where σ_i belongs to the ideal generated by the paths of length 3, $x_i, y_i \in F$ such that $x_1 x_4 \neq x_2 x_3$ and $y_1 y_4 \neq y_2 y_3$ [3, Theorem 1] (put $x_1 = 0, x_2 = 1, x_3 = 1, x_4 = 0, y_1 = 0, y_2 = 1, y_3 = 1, y_4 = 0, \sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = 0, s = 6, \sigma_5 = a_2 b_1 a_2 b_1, \sigma_6 = a_1 b_2 a_1 b_2$). So this algebra is of tame type.

□

Let us consider situation when matrix D has zero blocks.

$$D = \begin{pmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Let D has dimension $n \times m$ and block A has dimension r . Let us denote such matrix $D(n, m, r)$. This matrix is correctly define if $\min\{n, m\} \geq r + 1$.

Proposition 8. *Algebras $\mathcal{M}(D(n, m - 1, r))$ and $\mathcal{M}(D(n - 1, m, r))$ if they are defined are factor algebras of $\mathcal{M}(D(n, m, r))$.*

Proof is similar to one of proposition 4.

Corollary 3. *Algebra $\mathcal{M}(D(n, m, r))$ is wild if $r \geq 3$.*

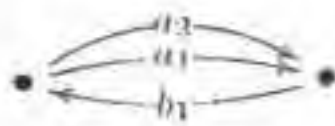
Proof. Suppose $r \geq 3$ then algebra $\mathcal{M}(D(n, m, r))$ has wild factor algebra $\mathcal{M}(D(A, r))$ (see proposition 6)

□

It remains to consider algebras $\mathcal{M}(D(n, m, 1))$, $\mathcal{M}(D(n, m, 2))$.

Proposition 9. *Algebras $\mathcal{M}(D(2, 3, 1))$ and $\mathcal{M}(3, 2, 1)$ are wild.*

Доведення. It enough to prove for the algebra $\mathcal{M}(D(2, 3, 1))$. As usual $\mathcal{M}(D(2, 3, 1))$ has system of generators $\{e_{11}, e_{12}, e_{21}, e_{31}\}$. Let us construct a quiver of this algebra. Let $\mathcal{A}$ be algebra with attached unit ε . It has two idempotents $e_1 = \varepsilon - e_{11}$, $e_2 = e_{11}$. Quiver for the algebra $\mathcal{M}(D(2, 3, 1))$ has following form



where $a_1 = e_{21}$, $a_2 = e_{31}$, $b_1 = e_{12}$ with relations $b_1 a_1 b_1 a_1 = 0$, $b_1 a_2 = 0$. It is easy to see that this algebra has factor W_2 [3, Theorem 2] so it is wild. $\square$

Corollary 4. Algebra $\mathcal{M}(D(n, m, 1))$ is wild if $\max\{n, m\} > 2$.

Proof. If $n > 2$ then $\mathcal{M}(D(n, m, 1))$ has factor $\mathcal{M}(D(3, 2, 1))$ so is wild. If $m > 2$ then $\mathcal{M}(D(n, m, 1))$ has factor $\mathcal{M}(D(2, 3, 1))$ so is wild. $\square$

Proposition 10. Algebras $\mathcal{M}(D(3, 4, 2))$ and $\mathcal{M}(4, 3, 2)$ are wild.

Proof. It enough to prove for the algebra $\mathcal{M}(D(3, 4, 2))$. As usual $\mathcal{M}(D(2, 3, 1))$ has system of generators $\{e_{11}, e_{12}, e_{13}, e_{21}, e_{31}, e_{41}\}$. Let $\mathcal{A}$ be algebra with attached unit ε . It has two minimal idempotents $e_1 = \varepsilon - e_{11}$, $e_2 = e_{11}$. Quiver for the algebra $\mathcal{M}(D(2, 3, 1))$ has tree arrows:

$$e_{21}, e_{31}, e_{41} : e_1 \rightarrow e_2$$

Then this algebra has factor W_1 [3, Theorem 2] so it is wild. $\square$

Corollary 5. Algebra $\mathcal{M}(D(n, m, 2))$ is wild if $\max\{n, m\} > 3$.

Proof. If $n > 3$ then $\mathcal{M}(D(n, m, 2))$ has factor $\mathcal{M}(D(4, 3, 2))$ so is wild. If $m > 3$ then $\mathcal{M}(D(n, m, 1))$ has factor $\mathcal{M}(D(3, 4, 2))$ so is wild. $\square$

6 Conclusions

In the article we considered representations of Rees semigroup over the group C_2 over a field of characteristic two (modular situation). All semigroups of finite and tame representation type are described.

References

1. Ponizovskii I. S. The finiteness of the type of a semigroup algebra of a finite completely simple semigroup. (Russian) / I. S. Ponizovskii / Zap. Nauch. Sem. Leningrad. Otdel. Mat. Inst. Steklov. (LOMI). – 1972. – Vol. 28 – P. 154-163.
2. Bondarenko V. M. Linear operators on S -graded vector spaces / V. M. Bondarenko / Linear algebra and its applications. – 2003. – Vol. 365 – P. 45-90.
3. Brustle Th. Tame two-point algebras without loops / Thomas Brustle, Yang Han / Preprint 00 – 040 SFB 343, Universitat Bielefeld. – 2000 – <http://www.mathematik.uni-bielefeld.de/~brustle/Publications/2ptnolop.html>

Надійшла до редакції 30.04.2010

УДК 544.165

О.В.Гайдай, І.А.Левандовський, Т.Є.Шубіна

Комп'ютерне моделювання взаємодії каркасних похідних з М2 каналом вірусу грипу

Комп'ютерними розрахунками показано, що найбільш активно М2-протонний канал блокують речовини, до складу яких входить високоліпофільний каркасний фрагмент з лабільною аміногрупою. Наявність метиленової групи між каркасом та аміно групою призводить до вільного обертання аміногрупи і сприяє більш вигідній її взаємодії з амінокислотами іонного каналу порівняно з амантадином.

Дані розрахунків дають змогу для визначення механізму дії каркасних сполук на вірус грипу типу А.

Ключові слова: Вірус грипу типу А, блокування М2 іонного каналу, антивірусні препарати, каркасні вуглеводні

E-mail: ts@xtf.ntu-kpi.kiev.ua

Статтю представив к.ф.-м.н. Кондраг'єв В.М.

1. Introduction.

The influenza A virus, with 27 known subtypes that range from low to high pathogenicity in the bird population, also infects humans and other mammals. Subtype H5N1, currently known as avian or bird flu, is of particular interest because of its increasing pathogenicity and its ability to form a new viral subtype to which there is no native immunity in human hosts.

The influenza virus is bound by a membrane taken from the plasma membrane of an infected cell. The M2 protein is present in this membrane and forms proton-selective channels that are essential to viral function. Based on experimental data, it is assumed that the M2 proton channel consists of a tetrameric array of parallel TM peptides with their N-termini directed towards the outside of the virus and has following amino acids sequence: N-term-L²⁶VVAAS³¹IIGILHLILWIL⁴³-C-term. [1], [2], [3], [4] It is also believed that residues Val²⁷, Ala³⁰, Ser³¹, Gly³⁴, His³⁷, Lys³⁸, and Trp⁴¹ form the pore lining; and it is also possible that histidine-37

A.V. Gayday, I.A. Levandovskiy, T.E. Shubina

Mechanism of Influenza A M2 Ion-Channel Inhibition

Binding of blockers to the Influenza A ion-channel is studied using automated docking calculations. Our study suggests that studied cage compounds inhibit the M2 ion channel by binding to the His37 residue. The adamantane cage fits into a pocket formed by Trp41 residue, while the hydrogen bond is formed between hydrogen atom of ammonium nitrogen and the nitrogen of histidine residue.

This finding is supported by available experimental data and should help to obtain better understanding of the inhibition mechanism of the Influenza A M2 ion channel.

Key Words: Influenza A, ion-channel inhibition, antiviral drugs, cage compounds

plays an important role in the gating of the channel, or in the mechanism of H⁺ transport or both.

Adamantane derivatives have been used successfully for the prevention and treatment of influenza A virus infection for more than 30 years. [5], [6], [7] It is proposed that these drugs inhibit influenza A virus replication by blocking the M2-protein ion channel. This prevents fusion of the viruses with the host-cell membranes and the release of viral RNA into the cytoplasm of infected cells. [8] There is experimental evidence that the amantadine blockade of the M2 channel occurs within the TM region. However, the mechanism of this process is still unclear.

It was recently discovered that the Influenza A virus now exhibits resistance to both, amantadine and rimantadine. [9] This resistance to adamantane derivatives is believed to be due to a serine-31-to-asparagine mutation in the M2-protein. [10] Also, it is possible that an amino acid substitution at positions 26, 27, 30 or 34 in the transmembrane region of the M2 protein is also responsible for resistance to these drugs. [7], [11]

In such cases, treatment by amantadine and rimantadine will be less predictably effective for treatment or prophylaxis in the event of a pandemic outbreak of influenza.

Obviously, better understanding the exact nature of M2 proton channel inhibition by amantadine and other possible drug candidates is needed. The present study aims at shedding some light into this problem.

2. Results and Discussion.

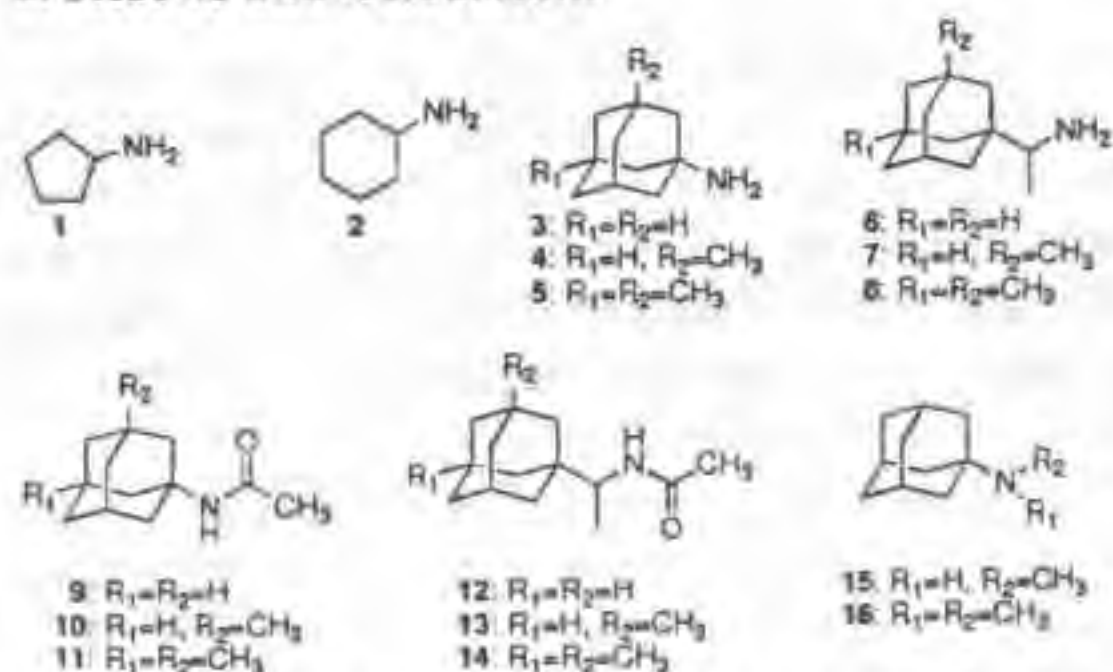


Fig. 1. Compounds 1–16 used in this work

Cyclopentylamine (1), cyclohexylamine (2), amantadine (3), rimantadine (6) and other adamantane derivatives (Fig. 1) in their protonated states were initially optimized at the B3LYP/6–31G(d) level [12],[13] of theory within the Gaussian03 program package. [14]

For modelling the transmembrane part of the M2 channel we used the PDB entry INYJ with the following amino acid sequence order: SSDPLVVAASIIG-ILHLILWILDRL.

Table 1. Estimated inhibition constants of the compounds 1–16.

The blockers and the protein were prepared for docking using ADT, the AutoDock tool graphical interface. [15] For each ligand Gasteiger charges were assigned and atomic solvation parameters were added. For the protein, polar hydrogen charges of Kollman-type were assigned and the non-polar hydrogens were merged with the carbons. The internal degrees of freedom and torsions were set for each ligand.

The AutoDock3.0 software [16] was used to obtain unbiased binding positions, estimate docking energies and inhibition constants for the studied compounds 1–16. The search was carried out with the Lamarckian Genetic Algorithm: a starting population of 150 ligand conformations with a stopping criteria of a maximum 10 millions energy evaluations. Evaluation of the results was done by sorting the different complexes with respect to the predicted binding energy. A cluster analysis based on RMSD values, with reference to the starting geometry, was subsequently performed.

The results of the docking study shows that the TM part of the M2 channel can be treated as three different binding pockets within large pore. The first binding pocket (I) is defined by Val²⁷-Ala³⁰-Ser³¹ residues of each α -helixes. It is believed that amantadine resistance is determined by amino acid exchanges within this region. Also, in an early molecular modelling study [17] Sansom et al. suggested localization of the amantadine binding site close to Ser³¹. In the formation of the second binding pocket (II) participate mostly Gly³⁴ and Ile³⁵. Finally, His³⁷ residue is responsible for the formation of the third binding pocket (III).

The computed docking energies of 1–16 within each binding pocket and computed respective inhibition constants (K_i) are summarized in Table 1. Both cyclic amines 1 and 2 exhibit the lowest binding energies to all three binding sites. Our study confirms that cyclopentylamine 1 does not block the M2 channel due to low binding energy and, thus, probable ability to pass through the pore, which is in agreement with its lack of antiviral activity in infected cells. [18],[19] While cyclohexylamine 2 is more bulky than cyclopentylamine 1, it still shows low inhibition properties. This correlates with the sensitivity of influenza virus replication to the size of aliphatic ring in the cyclic amines.

For all studied compounds His³⁷ binding site

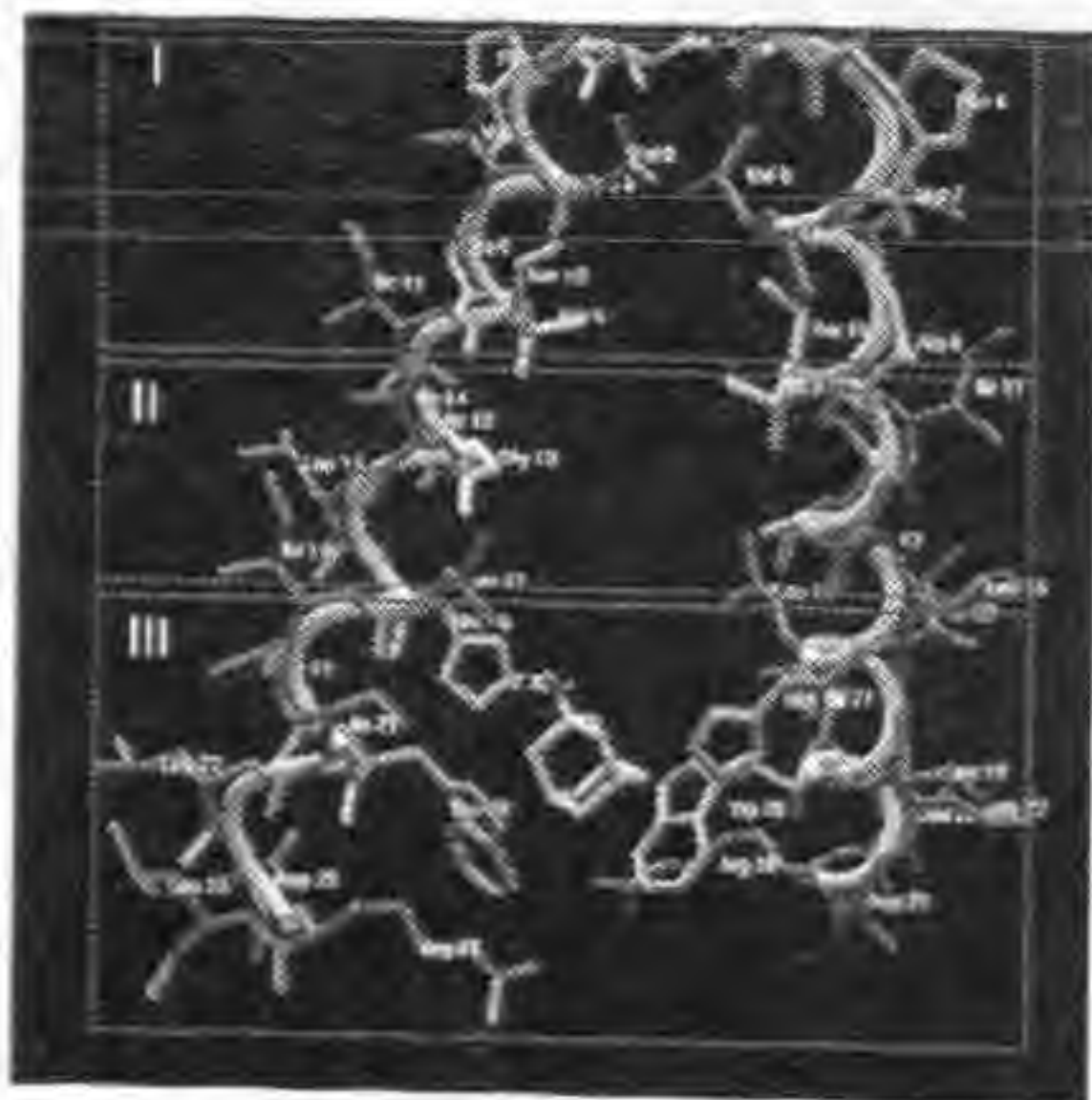
Cmpd	Inhibition constant (K_i)		
	Binding pocket		
	I	II	III
1	0.00	0.00	$2.48 \cdot 10^{-5}$
2	$6.17 \cdot 10^{-4}$	$2.81 \cdot 10^{-4}$	$6.44 \cdot 10^{-4}$
3	$5.68 \cdot 10^{-3}$	$1.13 \cdot 10^{-3}$	$1.29 \cdot 10^{-2}$
4	$4.78 \cdot 10^{-3}$	$8.25 \cdot 10^{-4}$	$2.45 \cdot 10^{-2}$
5	$1.05 \cdot 10^{-3}$	$1.87 \cdot 10^{-4}$	$3.98 \cdot 10^{-4}$
6	$1.66 \cdot 10^{-3}$	$3.86 \cdot 10^{-4}$	$1.97 \cdot 10^{-4}$
7	$7.34 \cdot 10^{-4}$	$1.40 \cdot 10^{-4}$	$8.16 \cdot 10^{-5}$
8	$2.32 \cdot 10^{-4}$	$4.53 \cdot 10^{-5}$	$3.52 \cdot 10^{-5}$
9	$1.34 \cdot 10^{-4}$	$5.02 \cdot 10^{-5}$	$2.21 \cdot 10^{-5}$
10	$4.03 \cdot 10^{-4}$	$5.75 \cdot 10^{-5}$	$1.38 \cdot 10^{-4}$
11	$3.27 \cdot 10^{-4}$	$9.93 \cdot 10^{-5}$	$8.06 \cdot 10^{-5}$
12	$7.71 \cdot 10^{-4}$	$1.84 \cdot 10^{-4}$	$5.74 \cdot 10^{-5}$
13	$4.03 \cdot 10^{-4}$	$5.75 \cdot 10^{-5}$	$1.33 \cdot 10^{-4}$
14	$2.17 \cdot 10^{-4}$	$3.24 \cdot 10^{-5}$	$5.25 \cdot 10^{-5}$
15	$2.29 \cdot 10^{-4}$	$8.64 \cdot 10^{-5}$	$6.01 \cdot 10^{-5}$
16	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$3.40 \cdot 10^{-4}$	$2.66 \cdot 10^{-4}$

(III) was found to be the most preferred one. Rimantadine 6 has higher binding energies and exhibits ca. 10-fold higher inhibition properties than amantadine 3. This can be explained by the presence of the CH group between amino group and adamantane cage, which allows rotation of the amino group and, therefore, assists closer and more favorable interaction with amino acid residues of the proton channel compared to amantadine.

Consequent substitution of hydrogens in 3- and 5- positions in the adamantane cage into methyl groups leading to compounds 4, 7, 10, 13 and 5, 8, 11, 14 increases binding energies and inhibition properties of 4, 5, 7–14 (Table 1).

Additional consequent introduction of methyl groups in adamantane cage of compounds 9 and 12 leading to compounds 10, 13 and 11, 14 also increases binding energies and inhibition properties as it was in case of amantadine and rimantadine (Table 1). In fact, increase of molecular volume of the inhibitor and presence of the acetyl group makes 14 the strongest blocker among studied compounds.

It should be mentioned that the nitrogen atom of amino group of all four ligands forms a hydrogen bond with the residues that form the binding pocket. The distance between the ammonium hydrogen and the oxygen atom of serine residue in the first binding pocket ranges from 2.37 Å (in 2), 2.0 Å (in 1 and 3) to 1.84 Å (4).



In the second binding pocket there is also possibility to form hydrogen bonds between the

hydrogen atom of NH_3 group and the oxygen atom of glycine. Nevertheless, for all ligands studied here the most preferred binding pocket is the third one. Interestingly enough, opposite to our findings, Sansom et al. [17] showed that near the His₃₇ residue there is a substantial barrier in case of amantadine and favorable interaction with cyclopentylamine.

Our docking study shows that the aliphatic rings and adamantane cage fit into a pocket formed by tryptophan-34, the hydrogen bond is formed between hydrogen of NH_3 group and the nitrogen of histidine residue, leading to more efficient blocking of the channel. Moreover, the difference in the estimated inhibition constants of amantadine (3) and rimantadine (4) docked into the binding pocket III agrees fortuitously with the experimentally observed order.

These findings are in agreement with recently proposed model [20] in which the ammonium nitrogen of amantadine shares a hydrogen bond with an unprotonated histidine-37 imidazole while the adamantyl group fits in the lipophilic pocket formed in the vicinity of Gly³⁴. It is also worth to note that a similar adamantane- NH_3 -His interaction has been also recently found [21] for the Hepatitis C virus ion channel p7.

The docking study shows that the M2 proton channel is blocked by cage compounds and suggests that the preferred binding site is in a vicinity of His₃₇ residue. The calculated inhibiting ability of amantadine and rimantadine reproduces the relations observed clinically.

We suggest that next generation of potential M2 inhibitors should include lipophilic adamantane or other hydrocarbon cage (i.e. trishomocubane) combined with polar groups (e.g. hydroxyl, carboxyl, urea/thiourea moiety) separated from cage by methylene bridges. Nevertheless, clearer understanding of the nature of inhibition mechanism is needed. One way of doing it - via molecular dynamic simulation of the whole M2 ion-channel and its interaction with inhibitors. Results of such study will be published elsewhere.

Acknowledgments. This work was supported by grants for the young scientists from the President of Ukraine (2006–2010).

References

1. Lamb R. A., Holsinger L. J., Pinto L. H., Wimmer E. The influenza A virus M2 ion channel protein and its role in the influenza virus life cycle // Ed.: Cold Spring Harbor Lab. Press: New York, – 1994. – 28. – P. 526.

2. Hay A. J. The action of adamantanamines against influenza A viruses: inhibition of the M2 ion channel protein // *Semin. Virol.* – 1992. – 3. – P. 21-30.
3. Chizhnikov I. V., Geraghty F. M., Ogden D. C., Hayhurst A., Antoniou M., Hay A. J. Selective proton permeability and pH regulation of the influenza virus M2 channel expressed in mouse erythroleukaemia cells // *Journal Physiol.* – 1996. – 494. – P. 329-336.
4. Shimbo K., Brassard D. L., Lamb R. A., Pinto L. H. Ion selectivity and activation of the M2 ion channel of influenza virus // *Biophys.* – 1996. – 70. – P. 1335-1346.
5. Tominack, R.L., Hyden, F. G. Rimantadine hydrochloride and amantadine hydrochloride use in Inuenza A virus infection // *Infectious Disease Clinics of North America.* – 1987. – 1. P. 459.
6. Dolin, R., Reichman, R.C., Madore, H. P., Maynard, R., Linton, P. N., Webber-Jones, J. A controlled trial of amantadine and rimantadine in the prophylaxis of influenza A virus // *N. Engl. Journal Med.* 1982. – 307. – P. 580.
7. Belshe, R. B., Smith, M.H., Hall, G.B. Bettis, R.; Hay, A. J. Genetic basis of resistance to rimantadine emerging during treatment of inuenza virus infection // *Journal of Virology* 1988 - 62. - P. 1508.
8. Wang C., Takeuchi K., Pinto L. H., Lamb, R. A. Ion channel activity of influenza A virus M2 protein: characterization of the amantadine block // *Journal of Virology* – 1993. – 67. – P. 5585-5594.
9. Evolution of H5N1 avian influenza viruses in Asia.
<http://www.cdc.gov/ncidod/EID/vol11no10/pdfs/05-0644.pdf>
10. Puthavathana P., Auewarakul P., Charoenying P. C. Molecular characterization of the complete genome of human influenza H5N1 viruses isolated from Thailand // *Journal Gen. Virol.* – 2005. – 86. – P. 423-433.
11. Hay A.J., Zambon M.C., Wolstenholme A. J., Skehel J.J., Smith M. H. Molecular basis of resistance of influenza A viruses to amantadine // *Journal Antimicrob. Chemother.* – 1986. – 8. – P. 19-29.
12. Becke, A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *Journal Chem. Phys.* – 1993 – 98, P. 5648- 5652.
13. Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Physical Review* -1988 – 37. – P. 785.
14. Gaussian 03, Revision B.03, Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
15. Sanner, M., Duncan, B., Carillo, C., Olson, A. Integrating computation and visualization for biomolecular analysis: an example using python and avs. // *Pac. Symp. Biocomput.* – 1999 – 401. – P. 412.
16. Morris, G. M., Goodsell, D. S., Halliday, R. S., Huey, R., Hart, W. E., Belew, R. K., Olson, A. Automated docking using a Lamarckian genetic algorithm and empirical binding free energy function. // *Journal Comp. Chem.*, - 1998 -19. – P. 1639.
17. Sansom, M. S., Kerr, I. D. Inuenza virus M2 protein: a molecular modelling study of the ion channel. // *Protein Engineering*, - 1993 – 6. – P. 65.
18. Hay, A. J., Wolstenholme, A. J., Skehel, J. J., Smith, M. H. // *EMBO Journal* – 1985 – 4. – P. 3021.
19. Hay, A. J., Zambon, M. Multiple actions of amantadine against inuenza virus, volume *Antiviral Drugs and Interferon: The Molecular basis of their activity.* 1984.
20. Mould J. A., Li H.C., Dudlak C. S., Lear J. D., Pekosz A., Lamb R. A., Pinto L. H. Mechanism for Proton Conduction of the M2 Ion Channel of Influenza A Virus // *The Journal of Biological Chemistry.* – 2000. – 275. – P. 8592.
21. Ptagrias, G., Zitzmann, N., Dwek., Fischer, W.B. Protein-Protein Interactions: Modeling the Hepatitis C Virus Ion Channel p7 // *Journal of Medicinal Chemistry* – 2006. – 49. – P. 648.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 512.647

Н.С. Головащук, старший наук. співробітник

Кососиметричні строго нільпотентні матриці малих розмірностей

У даній роботі одержані незвідні компоненти матричного багатовиду кососиметричних строго нільпотентних матриць малих розмірностей шляхом зведення матриць до деякого канонічного вигляду.

Ключові слова: афінний багатовид, строго нільпотентна матриця, ортогональне перетворення.

E-mail: golova@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., професор В.В.Кириченко

1 Вступ

Let $\mathcal{L}_n (= \mathcal{L}_n(\mathbb{C}))$, $n \geq 2$, be the orthogonal Lie algebra of skew symmetrical $(n \times n)$ -matrices over $\mathbb{C}$, $\{e_{ij} - e_{ji}\}$, $1 \leq i < j \leq n$ be its basis with e_{ij} be the matrix units, $U_n = U(\mathcal{L}_n)$ be its universal enveloping algebra, and Z_n be the center of U_n . For $m \leq n$ we consider U_m as a subalgebra in U_n by the inclusion $U_m \hookrightarrow U_n$, such that $e_{ij} - e_{ji} \mapsto e_{ij} - e_{ji}$, $1 \leq i < j \leq m$. Then the Gelfand-Zetlin subalgebra $\Gamma (= \Gamma_n \subset U_n)$ in $U = U_n$ is a commutative algebra, generated by the centers $Z_1, \dots, Z_n \subset U$. We denote by X_{ij} the class $\overline{e_{ij} - e_{ji}}$ in $\bar{U}$. It allows to identify $\bar{U}$ with the polynomial algebra in $\frac{n(n-1)}{2}$ indeterminates X_{ij} , $1 \leq i < j \leq n$, denoted by $\mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$.

For an associative and commutative algebra Λ we denote by $\text{Specm } \Lambda$ the variety of maximal ideals of Λ . If $I \subset \Lambda$ is an ideal, then $V(I) \subset \text{Specm } \Lambda$ is the set of all zeroes of I and if $C \subset \text{Specm } \Lambda$, then $I(C)$ is the ideal of elements of Λ , vanishing on C .

The points of the affine variety $M_n = \text{Specm } \mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ are $(n \times n)$ -matrices over $\mathbb{C}$. Let $X = (X_{ij})$ be the $(n \times n)$ -matrix with indeterminate elements. Define a map $p: M_n \rightarrow \mathbb{C}^{\frac{n(n+1)}{2}}$ as follows:

$$X \mapsto \left(\text{Tr}(X_k^j) \mid k \in \{1, \dots, n\}, j \in \{1, \dots, k\} \right)$$

where X_k is a submatrix of X formed by the first k rows and k columns. Note, that in [4] $p(X)$ is defined as a row of coefficients of the characteristic

N.S. Golovaschuk, Senior Researcher

Skew symmetrical strongly nilpotent matrices of small dimensions

The irreducible components of the matrix variety of skew symmetrical strongly nilpotent matrices of small dimensions is obtained by the reducing to some canonical forms.

Key Words: affine variety, skew symmetrical strongly nilpotent matrix, orthogonal transformation.

polynomials $\chi(X_k)$, $k = 1, \dots, n$:

$$p(X) = \left(\chi_{kj} \mid k \in \{1, \dots, n\}, j \in \{1, \dots, k\} \right)$$

These two definitions differ by an algebraic automorphism of $\mathbb{C}^{\frac{n(n+1)}{2}}$.

Denote by $N_n \subset M_n$ the subvariety of nilpotent matrices. It is known, that N_n is irreducible rational and $\dim N_n = n^2 - n$.

The matrix $X \in M_n$ is called *strongly nilpotent* if $X \in p^{-1}(0)$. It means that the matrix itself and all submatrices X_k , $k = 1, \dots, n$ are nilpotent. The variety $X_n = p^{-1}(0) \subset M_n$ of strongly nilpotent $(n \times n)$ -matrices is called the *characteristic Gelfand-Zetlin variety*.

The question of existence of some irreducible representations of gl_n corresponds to the linear algebraic question on dimensions of irreducible components of the matrix variety X_n .

This problem was investigated also by B. Kostant and N. Wallach, [4]. For the general case, S.Ovsienko [6] has proved that the variety X_n of strongly nilpotent matrices is a complete intersection. It means that every component of variety C_n has a maximal possible dimension, namely $\frac{n(n-1)}{2}$.

The investigation of the modules over the orthogonal Lie algebra $\mathcal{L}_n$ leads to analogous problems relating the variety Q of skew-symmetrical $n \times n$ matrices.

For the skew symmetrical matrix $X \in Q_n$, $\chi_{kj} = 0$ for all $j = 1, 3, \dots, 2\left[\frac{k-1}{2}\right] + 1$, and there is $\left[\frac{k}{2}\right]$ non zero non unit coefficients of $\chi(X_k)$.

Denote by $\mathbb{I}_k$ the ideal in $\mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ generated by $\left[\frac{k}{2}\right](1 + \left[\frac{k-1}{2}\right])$ elements $\{X_{kj}, 1 \leq j \leq k\}$ and all elements $X_{ij} - X_{ji}, i, j = 1, \dots, n$. Clearly, $\mathbb{I}_k \subset \mathbb{I}_n$ for $2 \leq k \leq n$.

2 Affine varieties and ideals

The ideal $I \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ is called an *admissible ideal* (n -admissible) provided $I \supset \mathbb{I}_n$. Clearly, $V(I) \subset Y_n$ if and only if the ideal I is admissible.

For $1 \leq i < j, k < l \leq n$, we consider the following polynomials from $\mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$:

$$\begin{aligned} X_{ij}^k &= X_{jk} - iX_{ik}, & \tilde{X}_{ij}^k &= X_{jk} + iX_{ik}, \\ S_{ij}^k &= X_{ik}^2 + X_{jk}^2 = X_{ij}^k \tilde{X}_{ij}^k, \\ X_{il}^{kl} &= X_{il} - iX_{ik}, & \tilde{X}_{il}^{kl} &= X_{il} + iX_{ik}, \\ S_{il}^{kl} &= X_{ik}^2 + X_{il}^2 = X_{il}^{kl} \tilde{X}_{il}^{kl}, \\ D_{ij}^{kl} &= X_{ik}X_{jl} - X_{jk}X_{il} \end{aligned} \quad (1)$$

where $i = i = \sqrt{-1}$ is a complex unit.

An ideal $I \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ is called *good defined* if it is generated by some elements X_{ij} and the generators of type (1), and each indeterminate X_{ij} enters at least one of generator polynomials. A matrix $A \in Y_n$ is called *good defined* if $A \in V(I)$ where I is good defined ideal.

We say that the ideal $I \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ is *linearly defined* if $I = (s_I)$ is generated by some set s_I of indeterminates X_{ij} and the polynomials of a type $X_{ij}^k, \tilde{X}_{ij}^k, X_{il}^{kl}$ or $\tilde{X}_{il}^{kl}$, moreover each indeterminate X_{ij} enters at least one of generator polynomials from s_I . In this case a generator set of $\mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]/I$ can be selected as some subset $x \subset \{(X_{ij})_{n,i < j}\}$. Clearly, $V(I) \subset Q_n$ is irreducible subvariety, and $\dim V(I) = |x|$.

The generator set s_I of linearly defined ideal I is called *reduced* if there doesn't exist any subset $s \subset s_I$ such that $I(s) = I(s_I)$. In this case $|s_I| + |x| = \frac{n(n-1)}{2}$.

We call $A = (a_{ij}) \in Y_n$ the *linearly defined strongly nilpotent r -parameter matrix* (or *domino matrix*) with the reduced generator set $x \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$, $r = |x|$, if there exists an admissible linearly defined ideal $I = I(s_I)$ such that $A \in V(I)$. In this case the following properties hold:

1. if $X_{ij} \in x$, $i < j$ then $a_{ij} = X_{ij}$;
2. for any i', k' , such that $X_{i',k'} \notin s_I$, one of the following possibilities occurs:

- (a) $X_{i',k'} \in I$;
- (b) there is $i < i'$ such that $X_{ik'} \in x$ and $\tilde{X}_{i,i'}^{k'} \in s_I$;
- (c) there is $k < k'$ such that $X_{i'k} \in x$ and $\tilde{X}_{i,i'}^{k,k'} \in s_I$;
- (d) there are $i < i', k < k'$ with $X_{ik} \in x$ such that either $\tilde{X}_{i,i'}^k, \tilde{X}_{i',k'}^{k,k'} \in s_I$ or $\tilde{X}_{i,i'}^{k,k'}, \tilde{X}_{i',k'}^k \in s_I$.

Lemma 1. For any $1 \leq i < j, k < l \leq n$ the varieties $V(S_{ij}^k)$ and $V(S_{ij}^k, S_{ij}^l, D_{ij}^{kl})$ are the following unions of irreducible linear subvarieties:

$$\begin{aligned} V(S_{ij}^k) &= V(X_{ij}^k) \cup V(\tilde{X}_{ij}^k), \\ V(S_{ij}^k, S_{ij}^l, D_{ij}^{kl}) &= V(X_{ij}^k, X_{ij}^l) \cup V(\tilde{X}_{ij}^k, \tilde{X}_{ij}^l), \end{aligned}$$

Proof. The first equality follows immediately from the equality $S_{ij}^k = X_{ij}^k \cdot \tilde{X}_{ij}^k$.

To prove the second observe that

$$\begin{aligned} V(S_{ij}^k, S_{ij}^l, D_{ij}^{kl}) &= V(X_{ik}, X_{jk}, S_{ij}^l) \cup \\ &V(X_{ij}^k, S_{ij}^l, D_{ij}^{kl}) \cup V(\tilde{X}_{ij}^k, S_{ij}^l, D_{ij}^{kl}) \end{aligned}$$

and take into consideration the equality $D_{ij}^{kl} = X_{ik}X_{jl} - X_{il}X_{jk}$. $\square$

Corollary 1. Let $I \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ be a good defined n -admissible ideal. Then there exist the linearly defined n -admissible ideals $I_1, \dots, I_k$ such that

$$V(I) = \bigcup_{i=1}^k V(I_k).$$

3 Orthogonal transformations

Let $\mathcal{O}_n$ be the group of all orthogonal $n \times n$ -matrices. The group $\mathcal{O}_n$ acts on Q_n by conjugations: $A \mapsto A^T = T^{-1}AT$, $T \in \mathcal{O}_n$.

Let $I_x \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ be some admissible ideal. The transformation $T \in \mathcal{O}_n$ is called *admissible for I* or *I -admissible* provided $A^T \in V(I)$ for each $A \in V(I)$. Denote by $G(I) \subset \mathcal{O}_n$ the group generated by all I -admissible transformations $T \in \mathcal{O}_n$. In particular, if $A \in Y_n$ and T is $\mathbb{I}_n$ -admissible then $A^T \in Y_n$ as well.

For any $A \in Q_n$ denote by I_A the maximal ideal from $\mathbb{C}[(X_{ij})_{n,i < j}]$ such that $A \in V(I_A)$, and by $G(A) = G(I_A)$.

We give some denotations for the special classes of orthogonal $n \times n$ -matrices will be used later.

Given a permutation $\sigma \in S_n$ denote by P_σ the correspondent permutation matrix, then $P_\sigma \in \mathcal{O}_n$. Let $P_{ij} \in \mathcal{O}_n$ corresponds to the transposition (ij) . By $Q_i \in \mathcal{O}_n$ we denote the diagonal matrix such that $Q_i = E_n - 2e_{ii}$, $1 \leq i \leq n$ where E_n is a unit matrix.

Given any $p \in \mathbb{C}$, let us fix some $p_1 \in \mathbb{C}$ such that $p^2 + p_1^2 = 1$. Denote by $T_{ij}(p, p_1)$, $1 \leq i \neq j \leq n$ the one parameter orthogonal matrix from $\mathcal{O}_n$ such that

$$T_{ij}(p, p_1) = E_n + p(e_{ij} - e_{ji}) + (p_1 - 1)(e_{ii} + e_{jj}).$$

For $i \neq j$, we have $T_{ji}(p, p_1) = T_{ij}(-p, p_1)$.

Lemma 2. Let $A = (a_{ij}) \in Y_n$, $T = T_{ij}(p, p_1) \in \mathcal{O}_n$, $A' = A^T$, and $k, l \notin \{i, j\}$, $k \neq l$. Then $x'_{ij} = x_{ij}$, $x'_{ji} = x_{ji}$, and the following equalities hold

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_{ij}^k(A') &= (p_1 + ip) \mathcal{X}_{ij}^k(A), \\ \bar{\mathcal{X}}_{ij}^k(A') &= (p_1 - ip) \bar{\mathcal{X}}_{ij}^k(A), \\ \mathcal{X}_k^{ij}(A') &= (p_1 + ip) \mathcal{X}_k^{ij}(A), \\ \bar{\mathcal{X}}_k^{ij}(A') &= (p_1 - ip) \bar{\mathcal{X}}_k^{ij}(A), \\ \mathcal{X}_i^{kl}(A') &= p_1 \mathcal{X}_i^{kl}(A) - p \mathcal{X}_j^{kl}(A), \\ \bar{\mathcal{X}}_i^{kl}(A') &= p_1 \bar{\mathcal{X}}_i^{kl}(A) - p \bar{\mathcal{X}}_j^{kl}(A). \end{aligned}$$

Proof. For the first case, $\mathcal{X}_{ij}^k(A') = (px_{ik} + p_1x_{jk}) - i(p_1x_{ik} - px_{jk}) = (p_1 + ip)(x_{jk} - ix_{ik})$. $\square$

There is the inclusion $\mathcal{O}_k \rightarrow \mathcal{O}_n$ such that $X \mapsto X \oplus E_{n-k} \in \mathcal{O}_n$. Denote by $\mathcal{O}_{n,k} \subset \mathcal{O}_n$ the subgroup isomorphic to $\mathcal{O}_k$ in such a way.

Given any $p \in \mathbb{C}^*$, $p \neq 0, \pm 1$ let us fix some $p_1 \in \mathbb{C}^*$ such that $p^2 + p_1^2 = 1$, in particular, $p_1 \neq 0, \pm 1$. Let i, j, k are pairwise different. We put

$$1. T_{ijk}(p, p_1) = T_{ik}(p, p_1)T_{jk}(\frac{ip}{p_1}, \frac{1}{p_1}) \in \mathcal{O}_n.$$

Denote $q = \frac{ip}{p_1}$, $q_1 = \frac{1}{p_1}$, then $T_{ijk}(p, p_1) = T_{ik}(p, p_1)T_{jk}(q, q_1)$ and $pq_1 + iq = 0$, $p_1q_1 = 1$. Moreover, we have the following formulae for the products of parameters:

$$\begin{aligned} p_1q_1 &= 1, \\ pq_1 &= -iq, \\ p_1q &= ip, \\ pq &= i(q_1 - p_1). \end{aligned} \quad (2)$$

$$2. \bar{T}_{ijk}(p, p_1) = T_{ik}(p, p_1)T_{jk}(\frac{ip}{p_1}, \frac{-1}{p_1}) \in \mathcal{O}_n.$$

In this case $\bar{T}_{ijk}(p, p_1) = T_{ik}(p, p_1)T_{jk}(q, q_1)$ where $q = \frac{ip}{p_1}$, $q_1 = -\frac{1}{p_1}$. We have

$$\begin{aligned} p_1q_1 &= -1, \\ pq_1 &= iq, \\ p_1q &= ip, \\ pq &= -i(q_1 + p_1). \end{aligned} \quad (3)$$

For the both cases the following equalities hold:

$$\begin{aligned} p^2 + p_1^2 &= 1, & q^2 + q_1^2 &= 1, \\ p^2 + q^2 - p^2q^2 &= 0, & p_1^2q_1^2 &= 1. \end{aligned}$$

We see that $T_{ijk}(p, p_1)$ and $\bar{T}_{ijk}(p, p_1)$ are one parameter orthogonal matrices from $\mathcal{O}_n$. Denote by $T_{ijk}(\mathbb{C}) = \{T_{ijk}(p, p_1) \mid p, p_1 \in \mathbb{C}, p^2 + p_1^2 = 1\}$ the correspondent one parameter family of orthogonal matrices. Similarly, $\bar{T}_{ijk}(\mathbb{C}) = \{\bar{T}_{ijk}(p, p_1) \mid p, p_1 \in \mathbb{C}, p^2 + p_1^2 = 1\}$.

4 The cases $n = 4, 5$.

For any $1 \leq i \neq j \leq n$ denote by $E_{ij} = e_{ij} - e_{ji} \in Y_n$.

Let $n = 4$. We have: $\mathbb{I}_2 = (x_{12})$, $\mathbb{I}_3 = (\mathbb{I}_2, S_{12}^3)$, $\mathbb{I}_4 = (\mathbb{I}_3, S_{12}^4 + x_{34}^2, (D_{12}^{34})^2)$.

Lemma 3. Let $A \in Y_4$ be non zero matrix. Then there is the orthogonal matrix $T \in \mathcal{O}_4$ and an admissible linearly defined ideal $I \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{4, i < j}]$ such that $A^T \in V(I) \subset Y_4$, and one of the following cases occur:

1.

$$\begin{aligned} I &= (\{X_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq 3}, X_{12}^4, X_{34}), \\ G(I) &= (T_{12}(\mathbb{C}), T_{123}(\mathbb{C}), T_{124}(\mathbb{C})), \\ A^T &= a(E_{14} + iE_{24}), \quad a \in \mathbb{C}. \end{aligned}$$

2.

$$\begin{aligned} I &= (X_{12}, X_{12}^3, X_{12}^4, X_{13}^4, X_{34}), \\ G(I) &= (T_{12}(\mathbb{C}), T_{34}(\mathbb{C}), T_{123}(\mathbb{C}), T_{124}(\mathbb{C})), \\ A^T &= a(E_{13} + iE_{23} + iE_{14} - E_{24}), \quad a \in \mathbb{C}. \end{aligned}$$

For $A \in Y_4$, the ideal I is defined uniquely.

Lemma 4. Let $A \in Y_5$ be non zero matrix. Then there is the orthogonal matrix $T \in \mathcal{O}_5$ and an admissible linearly defined ideal $I \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{5, i < j}]$ such that $A^T \in V(I) \subset Y_5$, and one of the following cases occur:

1. The idea of the proof. Given $X \in Y_n$ we consistently reduce the matrices X_k for $k = 1, \dots, n$ to the canonical form using the orthogonal transformations from the subgroup $O_{n,k} \subset O_n$ such that the canonical form of submatrix X_{k-1} does not change.

$$I = (\{X_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq 4}, X_{12}^5, X_{35}, X_{45}),$$

$$G(I) = (T_{12}(\mathbb{C}), T_{34}(\mathbb{C}), T_{123}(\mathbb{C}), T_{124}(\mathbb{C}), T_{125}(\mathbb{C})),$$

$$A^T = a(E_{15} + iE_{25}), \quad a \in \mathbb{C}.$$

2. **Theorem 5.2.** If C is an irreducible component of Y_n , and $n \leq 7$ then

$$I = (\{X_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq 3}, X_{12}^4, X_{34}, X_{15}, X_{25}, X_{34}^5),$$

$$G(I) = (T_{12}(\mathbb{C}), T_{123}(\mathbb{C}), T_{124}(\mathbb{C})),$$

$$A^T = a(E_{14} + iE_{24}) + b(E_{35} + iE_{45}), \quad a, b \in \mathbb{C}.$$

$$\dim C = \frac{n(n-2)}{4}, \quad n \equiv 0 \pmod{2},$$

$$\dim C = \frac{(n-1)^2}{4}, \quad n \equiv 1 \pmod{2}.$$

3. **Список використаних джерел**

$$I = (\{X_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq 3}, X_{12}^4, X_{12}^5, X_{15}^{45}, \{X_{ij}\}_{3 \leq i < j \leq 5}),$$

$$G(I) = (T_{12}(\mathbb{C}), T_{45}(\mathbb{C}), T_{123}(\mathbb{C}), T_{124}(\mathbb{C}), T_{125}(\mathbb{C})),$$

$$A^T = a(E_{14} + iE_{24} + iE_{15} - E_{25}), \quad a \in \mathbb{C}.$$

4. $I = (X_{12}, X_{12}^3, X_{12}^4, X_{12}^{34}, X_{15}, X_{25}, \tilde{X}_{34}^5),$
 $G(I) = (T_{12}(\mathbb{C}), T_{34}(\mathbb{C}), T_{123}(\mathbb{C}), T_{124}(\mathbb{C}), T_{345}(\mathbb{C})),$
 $A^T = a(E_{13} + iE_{23} + iE_{14} - E_{24}) + b(E_{35} \pm iE_{45}), \quad a, b \in \mathbb{C}.$

5. $I = (X_{12}, X_{12}^3, X_{12}^4, X_{12}^{34}, \tilde{X}_{12}^5, \{X_{ij}\}_{3 \leq i < j \leq 5}),$
 $G(I) = (T_{12}(\mathbb{C}), T_{123}(\mathbb{C}), T_{124}(\mathbb{C})),$
 $A^T = a(E_{13} + iE_{23} + iE_{14} - E_{24}) + b(E_{15} - iE_{25}), \quad a, b \in \mathbb{C}.$

For $A \in Y_5$, the ideal I is defined uniquely.

5 The matrices of small dimensions.

Theorem 5.1. Let $A \in Y_n$, $n \leq 7$ be non zero skew symmetrical strongly nilpotent matrix. Then there is the orthogonal matrix $T \in O_n$ and an admissible linearly defined ideal $I \subset \mathbb{C}[(X_{ij})_{n \times n}]$ such that $A^T \in V(I) \subset Y_n$ is skew symmetrical strongly nilpotent linearly defined matrix. The ideal I is uniquely defined by the matrix A .

1. S. Leng. Algebra, 1968.
2. M.F.Atyah, I.G.Macdonald. Introduction to Commutative Algebra. Addison-Wesley Publishing Company, 1969.
3. Gelfand I. M., Tsetlin M. S. Finite dimensional representations of the group of unimodular matrices, Doklady akad. Nauk SSSR, 71(1950), 1017-1020
4. Kostant B., Wallach N. Gelfand-Zeitlin theory from the perspective of classical mechanics I,II, Studies in Lie Theory Dedicated to A. Joseph on his Sixtieth Birthday, Progress in Mathematics, Vol. 243, 2006.
5. Drozd Yu., Ovsienko S., Futorny V. Harish-Chandra subalgebras and Gelfand-Zetlin modules, in "finite dimensional algebras and related topics NATO ASI Ser. C., Math. and Phys. Sci., 424, (1994), 79-93
6. S.A. Ovsienko. Strongly nilpotent matrices and Gelfand-Zetlin modules. Linear Algebra and its Applications 365 (2003), 349-367.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 517.983

Грушка Я.І. Інститут Математики НАН
України, м. Київ

Трансляційно інваріантні оператори і узагальнення поняття сліду за різницевою змінною

Побудована теорія банатових просторів
“узагальнених” операторів з обмеженим
проекційним слідом над заданим гільбертовим
простором. Такі простори можуть бути
корисними при дослідженні еволюційних
завдань для нескінченночастинкових квантових
систем.

Ключові слова: гільбертовий простір,
трансляційно інваріантний оператор, слід за
різницевою змінною, проекційний слід.

E-mail: grushka@math.kiev.ua

Статтю представив д-р-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

In many scientific works, devoted to the investigation of quantum many-particle systems, evolution is described by a group of operators, acting in the space $\mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$ of operators with bounded trace over Hilbert space $\mathfrak{H}$ [1]–[3]. But this space is not enough for investigation of the problems, which have a natural formulation in the class of operators with translation-invariant kernels, because these operators do not belong to the space $\mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$. That is why in [3] author states that operator groups are to be studied in more general operator spaces than $\mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$. This paper is devoted to the construction and investigation of these (more general) operator spaces.

2 Theorem of Translation-invariant Operator Trace.

Let $\mathfrak{H}$ be a separable complex Hilbert space. Then $\mathcal{L}(\mathfrak{H})$ is the space of bounded linear operators over $\mathfrak{H}$. For an operator $A \in \mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$ we consider $\text{Tr}(A)$ – the trace of operator A .

Let B be a self-adjoint (in general – unbounded) operator in $\mathfrak{H}$. We denote by $\sigma_p(B)$ the point spectrum of the operator B , and by $U(\tau)$ – the C_0 -group of unitary operators $U(\tau) = e^{i\tau B}$, $\tau \in \mathbb{R}$. We will say that an operator operator $A \in \mathcal{L}(\mathfrak{H})$ is translation-invariant relatively to the

Grushka Ya.I., Institute of Mathematics NAS of
Ukraine

Translation-invariant Operators and Generalized Difference Variable Trace

A theory of Banach spaces of “generalized” operators with bounded projection trace over a Hilbert space is constructed. These spaces can be applied for the description of evolution problems of infinite-particle quantum systems.

Key Words: Hilbert space, translation-invariant operator, difference variable trace, projection trace.

operator B if A commutes with the spectral resolution of B (which is equivalent to the condition $AU(\tau) = U(\tau)A$, $\tau \in \mathbb{R}$).

The main examples of translation-invariant operators are linear bounded operators in the space $\mathfrak{H} = L_2(\mathbb{R}^d)$, $d \in \mathbb{N}$, with translation-invariant kernel, as follows $(A_K x)(\vec{t}) = \int_{\mathbb{R}^d} K(\vec{t}, \vec{s}) x(\vec{s}) d\vec{s}$, $\vec{t} \in \mathbb{R}^d$, $x \in \mathfrak{H}$, where kernel $K : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{C}$ satisfies condition $K(\vec{t} + h, \vec{s} + h) = K(\vec{t}, \vec{s})$, $\vec{t}, \vec{s} \in \mathbb{R}^d$, $h \in \mathbb{R}$ (where $\vec{t} + h = (t_1 + h, \dots, t_d + h)$, $\vec{t} = (t_1, \dots, t_d) \in \mathbb{R}^d$). These operators are translation-invariant with respect to the generator of the group of translations in the diagonal direction, $(U^{(d)}(\tau)x)(\vec{s}) = x(\vec{s} + \tau)$, $\tau \in \mathbb{R}$, $\vec{s} \in \mathbb{R}^d$. These operators were investigated in [4]. And the next theorem shows that in the general case the trace of these operators do not exists.

Theorem 2.1 ([5]). Let operator $A \in \mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$, $A \geq 0$ be translation-invariant relatively the operator $B = B^*$ with $\sigma_p(B) = \emptyset$. Then $A = \mathbb{O}$.

Where $\mathbb{O}$ is zero operator in $\mathfrak{H}$.

Inversely, if $B = B^*$ and $\sigma_p(B) \neq \emptyset$ then, as it was shown in [5], surely there exists non-zero translation-invariant relatively to the B operator $A \in \mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$.

Since the trace of (nonzero) operators with translation-invariant kernel is undefined, in [4] for

these operators it was introduced the concept of the difference variable trace

$$\widetilde{\text{Tr}}(A_K) = \begin{cases} \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \widetilde{K}(t_1, \dots, t_d) dt_1 \dots dt_{i-1} dt_{i+1} \dots dt_d, & d > 1 \\ K(0, 0), & d = 1, \end{cases}$$

$1 \leq i \leq d$, where $\widetilde{K}(\vec{t}) = K(\vec{t}, \vec{t})$ (one can easily verify, that if K is translation-invariant kernel, then the value of $\widetilde{\text{Tr}}(A_K)$ do not depend on index i and variable t_i).

The problem of generalization of difference variable trace concept for operators in abstract Hilbert space arises naturally. To demonstrate a possible way of solving this problem, we consider the following spectral measure in the space $\mathfrak{H} = L_2(\mathbb{R})$:

$$(P(\Delta)x)(t) := \chi_\Delta(t)x(t), \quad x \in \mathfrak{H}, \Delta \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}),$$

where $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ is the Borel σ -algebra over $\mathbb{R}$ and χ_Δ is the characteristic function of the set Δ . Using this spectral measure, the difference variable trace of the operator $A_K \in \mathcal{L}(\mathfrak{H})$ ($\mathfrak{H} = L_2(\mathbb{R})$) with translation-invariant kernel K can be represented by the formula:

$$\widetilde{\text{Tr}}(A_K) = \frac{\text{Tr}(P(\Delta)A_KP(\Delta))}{m(\Delta)}, \quad (1)$$

$$\Delta \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}), 0 < m(\Delta) < \infty,$$

where m is the Lebesgue measure in $\mathbb{R}$. Note that in the equality (1) the value of $\widetilde{\text{Tr}}(A_K)$ does not depend on the set Δ . In the space $L_2(\mathbb{R}^d)$ ($d > 1$) formula (1) is also true, where instead of $P(\cdot)$ we can put any spectral measure of kind

$$(P_i^{(d)}(\Delta)x)(\vec{t}) := \chi_\Delta(t_i)x(\vec{t}),$$

$$x \in L_2(\mathbb{R}^d), \Delta \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}), i \in \overline{1, d}.$$

And now we come to the abstract situation.

3 Spaces of Generalized Vectors and Operators, Generated by Spectral Resolution.

Definition 3.1. Let pair $(R, \mathcal{R})$ be a measurable space (that is $\mathcal{R}$ is a σ -algebra of subsets of R). If $P(\cdot) : \mathcal{R} \rightarrow \mathfrak{H}$ is a spectral measure on $\mathcal{R}$ and μ is a scalar σ -finite, non-zero measure on $\mathcal{R}$ then the ordered Four $(R, \mathcal{R}, P, \mu)$ we will qualify as *projection space with measure* over the space $\mathfrak{H}$ (abbreviated variant is *PM-space* over $\mathfrak{H}$).

The next aim is to construct Banach space of operators with bounded projection trace for a given PM-space. But, as it was shown in [5, example 2], unlike the space $\mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$, the construction of the above-mentioned space as the subspace of $\mathcal{L}(\mathfrak{H})$ leads to an incomplete space. This means that the space $\mathcal{L}(\mathfrak{H})$ is "too small" for this aim. And now we will construct more wide operator space, which is necessary for our aim.

Let $(R, \mathcal{R}, P, \mu)$ be a PM-space. Denote:

$$\mathfrak{H}_{P, \mu}^+ := \bigcup_{\Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}}} P(\Delta)\mathfrak{H},$$

where

$$\mathcal{R}_{\mu\text{-fin}} = \{\Delta \in \mathcal{R} \mid \mu(\Delta) < \infty\}.$$

Definition 3.2. We will say that the sequence $\{x_n\}_{n=1}^\infty \subseteq \mathfrak{H}_{P, \mu}^+$ converges to the vector $x \in \mathfrak{H}_{P, \mu}^+$ in the sense of $\mathfrak{H}_{P, \mu}^+$ (denotation is $x_n \xrightarrow{(P, \mu)^+} x$), if and only if $\|x_n - x\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ and there exists the set $\Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}}$, such that $\{x_n\}_{n=1}^\infty \subseteq P(\Delta)\mathfrak{H}$.

One can easily verify that $\mathfrak{H}_{P, \mu}^+$ is a linear space with convergence (in the sense of [6, 7]) under the convergence $\xrightarrow{(P, \mu)^+}$. Especially, this means, that the operations of addition and scalar variable multiplication are continuous under this convergence.

Now we consider the space $\mathfrak{H}_{P, \mu}^- = (\mathfrak{H}_{P, \mu}^+)^'$ of anti-linear continuous functionals over the space $\mathfrak{H}_{P, \mu}^+$, i.e. the space of functionals $l : \mathfrak{H}_{P, \mu}^+ \rightarrow \mathbb{C}$, such, that

$$a) \quad l(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2) = \bar{\alpha}_1 l(x_1) + \bar{\alpha}_2 l(x_2),$$

$$x_1, x_2 \in \mathfrak{H}_{P, \mu}^+, \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C};$$

$$b) \quad \text{If } \mathfrak{H}_{P, \mu}^+ \ni x_n \xrightarrow{(P, \mu)^+} x \in \mathfrak{H}_{P, \mu}^+, \text{ then } l(x_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} l(x).$$

Proposition 3.1. Anti-linear functional $l : \mathfrak{H}_{P, \mu}^+ \rightarrow \mathbb{C}$ belongs to the space $\mathfrak{H}_{P, \mu}^-$ if and only if for any set $\Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}}$ the functional:

$$l_\Delta(x) = l(P(\Delta)x), \quad x \in \mathfrak{H} \quad (2)$$

belongs to the space $\mathfrak{H}' = \mathfrak{H}$.

Definition 3.3. We will say that the sequence $\{l_n\}_{n=1}^\infty \subseteq \mathfrak{H}_{P, \mu}^-$ converges (strongly) to the functional $l \in \mathfrak{H}_{P, \mu}^-$ in the sense of $\mathfrak{H}_{P, \mu}^-$ (denotation is

$l_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{(P,\mu)^-} l$ if and only if for any set $\Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}}$ we have

$$\|(l_n)_\Delta - l_\Delta\| \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0,$$

where $(l_n)_\Delta$ and l_Δ are defined in (2).

Note that instead of the weak convergence (which often appears in the theory of rigged spaces) [8, 9] we will consider only strong convergence in the sense of definition 3.3. It is not hard to prove that $\mathfrak{H}_{P,\mu}^-$ is a linear space with convergence under this definition.

We can include space $\mathfrak{H}$ into the space $\mathfrak{H}_{P,\mu}^-$ using the standard identification of element $x \in \mathfrak{H}$ with the functional $\psi[x]$ ($x = \psi[x]$), where $\psi[x](y) := (x, y)$, $y \in \mathfrak{H}_{P,\mu}^+$.

Proposition 3.2. All embeddings in $\mathfrak{H}_{P,\mu}^+ \subseteq \mathfrak{H} \subseteq \mathfrak{H}_{P,\mu}^-$ are dense and continuous.

Further we will consider the space $\mathcal{L}(\mathfrak{H}_{P,\mu}^-)$ of linear continuous operators over the space $\mathfrak{H}_{P,\mu}^-$, that is the space of such linear operators $Q : \mathfrak{H}_{P,\mu}^- \rightarrow \mathfrak{H}_{P,\mu}^-$ that for any sequence $\{f_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathfrak{H}_{P,\mu}^-$ such that $f_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{(P,\mu)^-} 0$ we have $Qf_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{(P,\mu)^-} 0$.

Proposition 3.3. For any set $\Delta \in \mathcal{R}$ an unique operator $\mathbb{P}(\Delta) \in \mathcal{L}(\mathfrak{H}_{P,\mu}^-)$ exists such that $P(\Delta) \subseteq \mathbb{P}(\Delta)$. Operators $\{\mathbb{P}(\Delta) : \Delta \in \mathcal{R}\}$ have the following properties:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\emptyset) &= 0; \quad \mathbb{P}(R) = I; \quad \mathbb{P}(\Delta)^2 = \mathbb{P}(\Delta); \\ \mathbb{P}(\Delta_1 \cap \Delta_2) &= \mathbb{P}(\Delta_1) \mathbb{P}(\Delta_2), \end{aligned} \quad (3)$$

where $\Delta, \Delta_1, \Delta_2 \in \mathcal{R}$. Moreover if $\{\Delta_n\}_{n=1}^\infty \subseteq \mathcal{R}$ and $\Delta_i \cap \Delta_j = \emptyset$ for all $i, j \in \mathbb{N}$ such, that $i \neq j$ then

$$\mathbb{P}\left(\bigcup_{n=1}^\infty \Delta_n\right) = \sum_{n=1}^\infty \mathbb{P}(\Delta_n),$$

where convergence is in the strong sense over $\mathfrak{H}_{P,\mu}^-$.

In the proposition 3.3, 0 and I are zero and identity operators in the space $\mathcal{L}(\mathfrak{H}_{P,\mu}^-)$.

The space of "generalized operators". The main object of the further consideration is the space $\mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H}) := \mathcal{L}(\mathfrak{H}_{P,\mu}^+, \mathfrak{H}_{P,\mu}^-)$ of linear continuous operators from the space $\mathfrak{H}_{P,\mu}^+$ to the space $\mathfrak{H}_{P,\mu}^-$.

Proposition 3.4. A linear operator $A : \mathfrak{H}_{P,\mu}^+ \rightarrow \mathfrak{H}_{P,\mu}^-$ belongs to the space $\mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ if and only if

$$\forall \Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}} \quad (\mathbb{P}(\Delta)AP(\Delta) \in \mathcal{L}(\mathfrak{H})).$$

Definition 3.4. We will say that the sequence $\{A_n\}_{n=1}^\infty \subseteq \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ converges (uniformly) to an operator $A \in \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ in the space $\mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ (denotation is $A_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{(P,\mu)^-} A$) if and only if for any set $\Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}}$ we have

$$\|\mathbb{P}(\Delta)A_nP(\Delta) - \mathbb{P}(\Delta)AP(\Delta)\| \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

It can be proved that $\mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ is a linear space with convergence under the convergence, introduced in definition 3.4.

Theorem 3.1. The space $\mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ is complete.

Note that completeness in the Theorem 3.1 should be understood in the sense of [6, 7] (this means that any sequence of operators $\{A_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ such that $A_{n_k} - A_k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{(P,\mu)^-} 0$ for any subsequence $\{A_{n_k}\}_{k=1}^\infty$, must be convergent in the sense of definition 3.4).

The space $\mathcal{L}(\mathfrak{H})$ can be embedded into the space $\mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ by means of identification of operator $A \in \mathcal{L}(\mathfrak{H})$ with the operator $A_+ \in \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$, where A_+ is the restriction of the operator A to the space $\mathfrak{H}_{P,\mu}^+$. Thus, we can assume that

$$\mathcal{L}(\mathfrak{H}) \subseteq \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H}).$$

4 The Spaces of Operators with Bounded Projection Trace.

For an operator $A \in \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathfrak{H})$ we introduce the following denotations:

$$\nu_{P,A}(\Delta) := \text{Tr}(|\mathbb{P}(\Delta)AP(\Delta)|), \quad \Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}};$$

$$\|A\|_{P,\mu} := \sup \left\{ \frac{\nu_{P,A}(\Delta)}{\mu(\Delta)} \mid \Delta \in \mathcal{R}_{\mu\text{-fin}}, \mu(\Delta) + \nu_{P,A}(\Delta) > 0 \right\}, \quad (4)$$

where in the case $\mathbb{P}(\Delta)AP(\Delta) \notin \mathcal{L}^1(\mathfrak{H})$ we put $\text{Tr}(|\mathbb{P}(\Delta)AP(\Delta)|) := \infty$, and in the case $\mu(\Delta) = 0$ we put $\frac{\nu_{P,A}(\Delta)}{\mu(\Delta)} := \infty$. Since $\mu \neq 0$, definition of

the $\|\cdot\|_{P,\mu}$ is correct (i.e. the set under sup in (4) is not empty).

Since the value of $\|A\|_{P,\mu}$ is not finite for all $A \in \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathcal{H})$, we can consider the class of operators:

$$\mathfrak{T}_{P,\mu}(\mathcal{H}) := \left\{ A \in \mathcal{L}_{P,\mu}^{+-}(\mathcal{H}) \mid \|A\|_{P,\mu} < \infty \right\}.$$

Theorem 4.1. $(\mathfrak{T}_{P,\mu}(\mathcal{H}), \|\cdot\|_{P,\mu})$ is a Banach space.

5 Generalized Projection Trace definition.

Theorem 5.1. Let $A \in \mathfrak{T}_{P,\mu}(\mathcal{H})$. Then

1) The set-function $\tau_{P,A}(\Delta) = \text{Tr}(\mathbb{P}(\Delta)AP(\Delta))$, $\Delta \in \mathcal{R}_{\mu-\text{fin}}$ is a complex-valued charge on the ring of sets $\mathcal{R}_{\mu-\text{fin}}$.

2) Charge $\tau_{P,A}(\cdot)$ is absolutely continuous relatively to the measure μ . This means that there exists the Radon-Nikodym derivative $\frac{d\tau_{P,A}}{d\mu}$, that is a (μ -almost everywhere unique) function $\frac{d\tau_{P,A}}{d\mu} : R \mapsto \mathbb{C}$, such that for any set $\Delta \in \mathcal{R}_{\mu-\text{fin}}$ the following equality is true:

$$\tau_{P,A}(\Delta) = \int_{\Delta} \frac{d\tau_{P,A}}{d\mu}(\xi) d\mu(\xi).$$

The Radon-Nikodym derivative, referred to in the theorem 5.1, we will call the **generalized projection trace** of the operator $A \in \mathfrak{T}_{P,\mu}(\mathcal{H})$:

$$\widetilde{\text{Tr}}_{P,\mu}[A] := \frac{d\tau_{P,A}}{d\mu}.$$

In the general case $\widetilde{\text{Tr}}_{P,\mu}[A]$ is a complex-valued function, defined on the set R . But for the operator A_K in $L_2(\mathbb{R}^d)$ with translation-invariant kernel K this function is constant coinciding with the difference variable trace $\widetilde{\text{Tr}}(A_K)$.

References

1. Cercignani C., Gerasimenko V.I., and Petrina D.Ya. *Many-Particle Dynamics and Kinetic Equations*. – Kluwer Acad. Publ., 1997. – 252 p.

2. Arnold A. *Mathematical properties of quantum evolution equations*. // Lect. Notes in Math. – vol 1946. – Springer, 2008. – P. 45-109.
3. Gerasimenko V.I. *Groups of Operators for Evolution Equations of Quantum Many-particle Systems*. // Operator Theory: Advances and Applications. – vol 191. – Birkhauser Verlag Basel, 2009. – P. 341-355.
4. Petrina D.Ya. *Mathematical Foundations of Quantum Statistical Mechanics. Continuous Systems*. – Amsterdam: Kluwer, 1995. – 624 p.
5. Grushka Ya.I. *The Spaces of Operators with Bounded Projector Trace*. // Mathematical messengers NTSh. (Scientific Society of T.G. Shevchenko) – 2009, v. 6. – P. 73-86. (Ukrainian).
6. Doldrey R.M. *On sequential convergence*. // Trans. Amer. Math. Soc. – 1964. – V. 122. – P. 483-507.
7. Mosyagin V.V., Shirokov B.M. *Linear spaces with convergence and the cone* // Proceedings of the Petrozavodsk State University, a series of "Mathematics". – Issue 8. – 2001. – P.14-19. (Russian).
8. Berezansky Yu.M., Kondrat'ev Yu.G. *Spectral Methods in Infinite-dimensional Analysis*. – Kiev: Naukova Dumka, 1988. – 680 p. (Russian).
9. Gorbachuk V.I., Gorbachuk M.L. *Boundary value problems for operator differential equations*. (Translated and revised from the 1984 Russian original). – Kluwer Academic Publishers Group, Mathematics and its Applications (Soviet Series), 48. 1991. – xii. – 347 pp.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 519.5

М.С. Хрипченко, аспірант

Регулярні елементи фінітарних кілець інцидентності

Ми описуємо регулярні елементи кільця $FI(\mathcal{C})$ (див. [1]). Як наслідок, ми отримуємо необхідну умову надрегулярності для елементів $FI(\mathcal{C})$. Ці результати використовуються для узагальнення [2, Theorem 4] та [2, Corollary 4] на випадок алгебри $FI(P, R)$, де P — квізівпорядкована множина зі скінченними класами, а R — кільце.

Ключові слова: алгебра інцидентності, преадитивна категорія, частково впорядкована множина, квізівпорядкована множина.

E-mail: NSKhripchenko@mail.ru

Стаття представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

The finitary incidence algebra $FI(P, R)$ was introduced in [2] as a generalisation of the incidence algebra to the case of an arbitrary partially ordered set (poset). For a poset P and an associative unital ring R this algebra consists of the so-called finitary series, i.e. the formal sums of the form

$$\alpha = \sum_{x \leq y} \alpha(x, y)[x, y],$$

where $\alpha(x, y) \in R$, $[x, y] = \{z \in P \mid x \leq z \leq y\}$ and for any $[x, y]$ there exists only a finite number of $[u, v] \subset [x, y]$, $u < v$ with $\alpha(u, v) \neq 0$. It is easy to see that $FI(P, R)$ coincides with the well known incidence algebra when P is locally finite. Some properties of the finitary algebra were investigated in [2], in particular, the sets of invertible elements, idempotents and regular elements were described. As a consequence, the isomorphism problem for the finitary algebras over a field was solved positively. In order to extend the last result to the case of the quasiordered sets, the notion of the incidence ring of a precategory was introduced [1]. Recall its definition. Let $\mathcal{C}$ be a preadditive small category. Assume that the binary relation $\leq$ on the set of its objects such that $x \leq y \iff \text{Mor}(x, y) \neq 0_{xy}$ is a partial order. Then $\mathcal{C}$ is said to be partially ordered [1] (or a

N.S. Khripchenko, PhD student

Regular elements of finitary incidence rings

We describe the regular elements of the ring $FI(\mathcal{C})$ (see [1]). As a consequence, we obtain the necessary condition for the element of $FI(\mathcal{C})$ to be superregular. These results are used to generalize [2, Theorem 4] and [2, Corollary 4] to the case of $FI(P, R)$, where P is a quasiordered set with finite classes and R is a division ring.

Key Words: incidence algebra, preadditive category, poset, quasiordered set.

precategory for short). Consider the set of formal sums of the form

$$\alpha = \sum_{x \leq y} \alpha_{xy}[x, y],$$

where $\alpha_{xy} \in \text{Mor}(x, y)$, $[x, y]$ is a segment of the partial order, and for any $x, y \in \text{Ob } \mathcal{C}$, $x < y$ there exists only a finite number of $[u, v] \subset [x, y]$ such that $u < v$ and $\alpha_{uv} \neq 0_{uv}$. The formal sum with the mentioned properties is called a *finitary series*. The set of the finitary series is denoted by $FI(\mathcal{C})$. The addition of the finitary series is inherited from the addition of the morphisms. The multiplication is defined by means of the convolution:

$$\alpha\beta = \sum_{x \leq y} \left(\sum_{x \leq z \leq y} \alpha_{xz}\alpha_{zy} \right) [x, y],$$

where $\alpha_{xz}\alpha_{zy} = \alpha_{zy} \circ \alpha_{xz} \in \text{Mor}(x, y)$. Under these operations $FI(\mathcal{C})$ forms an associative ring [1, Theorem 1] with the identity $\delta = \sum_{x \in \text{Ob } \mathcal{C}} \text{id}_x [x, x]$ which is called a *finitary incidence ring of a precategory*. In particular, if $P(\leq)$ is a quasiordered set, then define $\text{Ob } \mathcal{C}$ to be the set $\bar{P}$ of the classes of the associated equivalence relation $\sim$ with the induced order $\leq$. For any pair $\bar{x}, \bar{y} \in \text{Ob } \mathcal{C}$, $\bar{x} \leq \bar{y}$ set $\text{Mor}(\bar{x}, \bar{y})$ to be the additive group $M_{\bar{x} \times \bar{y}}(R)$ of the matrices $|\bar{x}| \times |\bar{y}|$

Proposition 1. Let α_D be superregular. Then α_{xx} is the superregular element of the ring $Mor(x, x)$ for all $x \in Ob C$.

Proof. It immediately follows from (4) and (1) that for each superregular $\alpha \in FI(C)$ with the diagonal α_D we have $(\alpha_D)^* = (\alpha^*)_D$. Thus $(\alpha^*)_{xx}$ is inverse to α_{xx} for all $x \in Ob C$. Suppose there is $\chi_{x_0 x_0} \in Mor(x_0, x_0)$ which is inverse to $\alpha_{x_0 x_0}$ and different from $(\alpha^*)_{x_0 x_0}$. Consider $\chi = \sum_{x \neq x_0} (\alpha^*)_{xx} [x, x] + \chi_{x_0 x_0} [x_0, x_0]$. Obviously $\chi \neq \alpha_D^*$ and χ is inverse to α_D , a contradiction. ■

The converse of this proposition is not true as we shall see in the next section.

3 Regular elements of $FI(P, R)$

In this section $P(\preceq)$ is a quasiordered set whose classes under the natural equivalence relation $\sim$ are finite, $\bar{P}(\leq)$ is the poset associated with P , R is a division ring. We apply the results of the previous section to the algebra $FI(P, R)$.

Consider $\alpha \in FI(P, R)$. By Remark 1 the series α_D is regular iff $\alpha_{\bar{x}\bar{x}}$ is a regular element of the ring $M_{\bar{x} \times \bar{x}}(R)$ for each $\bar{x} \in \bar{P}$. Using Gaussian elimination algorithm, we can write any matrix $\alpha_{\bar{x}\bar{x}}$ over a division ring in the form $\beta_{\bar{x}\bar{x}} \epsilon_{\bar{x}\bar{x}} \gamma_{\bar{x}\bar{x}}$, where $\beta_{\bar{x}\bar{x}}, \gamma_{\bar{x}\bar{x}}$ are the invertible matrices and $\epsilon_{\bar{x}\bar{x}}$ is a diagonal matrix with zeros and units on its diagonal. So in this case Theorem 1 becomes as follows.

Corollary 2. A series $\alpha \in FI(P, R)$ is regular iff $\alpha = \beta \epsilon \gamma$, where $\beta, \gamma \in FI(P, R)$ are invertible and $\epsilon \in FI(P, R)$ is a diagonal series such that $\epsilon_{\bar{x}\bar{x}}$ is a diagonal idempotent matrix for all $\bar{x} \in \bar{P}$. ■

This is a generalisation of [2, Theorem 4]. Using this corollary, we can describe the set of superregular elements of $FI(P, R)$.

Corollary 3. Let $P = \bigcup_{i \in I} P_i$ be the decomposition of P into the disjoint union of its connected components, $FI(P_i, R)^*$ the group of the invertible elements of $FI(P_i, R)$. Then the set of superregular elements of $FI(P, R)$ coincides with the direct product of the semigroups $\prod_{i \in I} (FI(P_i, R)^* \cup 0)$.

Proof. It is obvious that $FI(P, R) \cong \prod_{i \in I} FI(P_i, R)$. Thus it is sufficient to prove that for a connected P each superregular element of $FI(P, R)$ is either invertible or zero.

Assume P to be connected and consider a superregular $\alpha \in FI(P, R)$. By Corollary 2 we can take $\alpha = \sum_{\bar{x} \in \bar{P}} \alpha_{\bar{x}\bar{x}} [\bar{x}, \bar{x}]$, where $\alpha_{\bar{x}\bar{x}}$ is a diagonal idempotent matrix. Then α is an idempotent and thus $\alpha^* = \alpha$. Suppose that $\alpha \notin \{0, \delta\}$. This means that there are $\bar{x} \leq \bar{y}$ and $x' \in \bar{x}, y' \in \bar{y}$ such that $\alpha_{\bar{x}\bar{x}}(x', x') = 0, \alpha_{\bar{y}\bar{y}}(y', y') = 1$ (here $\alpha_{\bar{x}\bar{x}}(x', x')$ and $\alpha_{\bar{y}\bar{y}}(y', y')$ denote the elements of the matrices $\alpha_{\bar{x}\bar{x}}$ and $\alpha_{\bar{y}\bar{y}}$ which correspond to the pairs (x', x') and (y', y') , respectively). Define $\rho_{\bar{x}\bar{y}} \in M_{\bar{x} \times \bar{y}}(R)$ to be the matrix unit with 1 in the position (x', y') and $\rho = \rho_{\bar{x}\bar{y}} [\bar{x}, \bar{y}]$. Then $\alpha \rho = 0, \rho \alpha = \rho$, which implies that $\alpha + \rho$ is inverse to α . Hence $\alpha + \rho = \alpha$, a contradiction. ■

This statement generalizes [2, Corollary 4].

References

1. N.S. Khripchenko, *Finitary incidence algebras of quasiorders*, Matematychni Studii (submitted).
2. N.S. Khripchenko and B.V. Novikov, *Finitary incidence algebras*, Communications in Algebra, **37**(2009), no. 5, 1670–1676.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 539.1

В.М. Кондратьєв, канд.ф.-м.н.

Горіння атомних ядер

Хімічні елементи у Всесвіті (їх властивості та перетворення) розглядаються в роботі як паливо, що живить еволюцію зірок, галактик, і т.д. Реакції термоядерного синтезу представляють джерело енергії зірок і, зокрема, Сонця, яке живить життя на Землі. Це породжує питання про походження та умови виникнення життя. Ми обговорюємо деякі специфічні особливості ланцюжків ядерних реакцій при гідростатичному горінні нуклідів в зірках і спроби створення термоядерних реакторів на Землі. Нові та наднові зірки розглядаються як перспективні кандидати астрофізичних областей для синтезу важких атомних ядер і відновлення інших ядерних компонентів.

При такому вибуховому нуклеосинтезі утворюються, особливо, актиніди, що містять основне паливо для ядерних реакторів ділення. Ми коротко аналізуємо e -, s -, і r -процеси, звернувши увагу до ультра-сильного намагнічування в зірках, і обговорюємо деякі ідеї для відпалу радіоактивних токсичних відходів атомної енергетики.

V.N. Kondratyev, PhD

Burning the atomic nuclei

We consider chemical elements in the Universe (their properties and transmutations) as a fuel powering an evolution of stars, galaxies etc. The nuclear fusion reactions represent an energy source of stars and, in particular, the Sun fitting the life on the Earth. This brings a question on an origin and conditions for creation of life. We discuss some specific features of nuclear reaction chains at the hydrostatic burning of nuclides in stars and treatises for development of thermonuclear fusion reactors at the Earth based environment. The nova and supernova give promising astrophysical site candidates for synthesis of heavy atomic nuclei and renewing other nuclear components. Such explosive nucleosynthesis yields, especially, the actinides containing basic fuel for nuclear fission reactors, among others. We briefly outline the e -, s -, p -, r -processes while accounting for ultra-strong stellar magnetization, and discuss then some ideas for annealing the radioactive toxic nuclear waste.

This work is supported in part by the Alexander von Humboldt Foundation and the VIRGO observatory at Physical Faculty, Taras Shevchenko National University of Kiev

1. The nuclear fuel.

It is commonly recognized by past that the energy driving an evolution of many sites of the Universe, e.g., biological species on the Earth, stars, galaxies, comes from nuclear reactions, i.e. the reactions involving atomic nuclei.

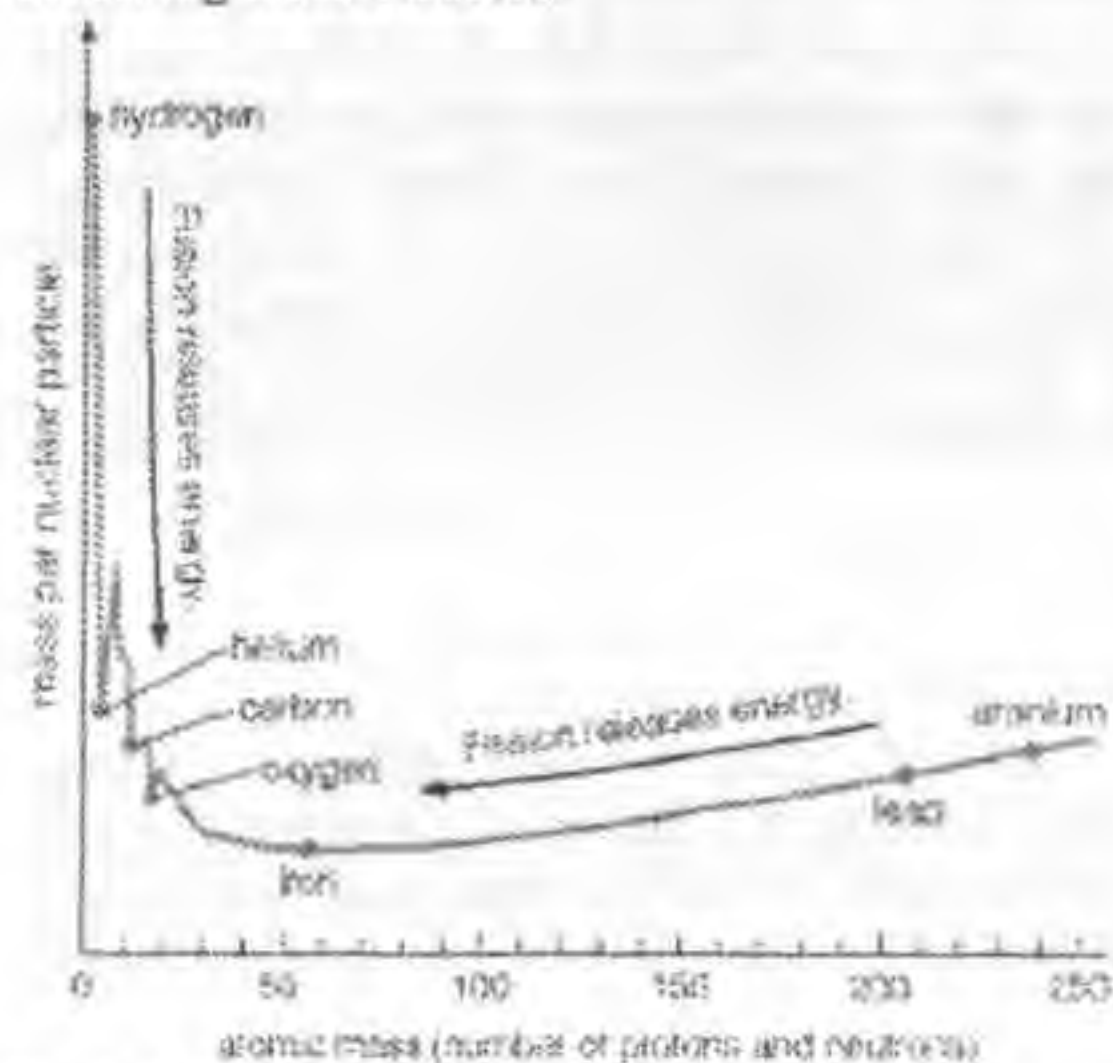


Fig.1 Schematic view of stable nuclide binding energy versus mass number, cf. Ref. [1].

© V.N. Kondratyev, 2010

Therefore, the studies of nuclear matter are crucial for learning and exploring such a renewable source of energy. The binding energy of nucleon aggregates, i.e. atomic nuclei, represents the first clue for an understanding of basic properties of the nuclear fuel. As is seen in Fig. 1 the transition metals of iron series represent the most tightly bound nuclides marking a bottom of fusion-fission valleys on the nuclear binding energy chart discovered in the Earth based laboratory. As a consequence the energy can be released either in the fusion reactions of nuclides which are lighter than iron or in a fission of heavy atomic nuclei with mass numbers larger than 56. This property gives then basic concepts for nuclear fission and thermonuclear fusion reactors with fundamental consequences on origin and processing the nuclear fuel.

2. The stars in the Hertzsprung-Russell diagram.

We now start a discussion of hydrostatic burning of atomic nuclei in stars, i.e., the main sequence stars giving a track in the Hertzsprung-Russell diagram, or HR diagram. The HR diagram represents a plot of on a plane where the ordinate (vertical) axis represents the luminosity while the absciss (horizontal) axis

shows the surface temperature (as measured by a color of a star). Stellar luminosities vary from (10^{-4} - 10^6) that of our sun, with surface temperatures ranging, respectively, from 2000 to 50000 °K.

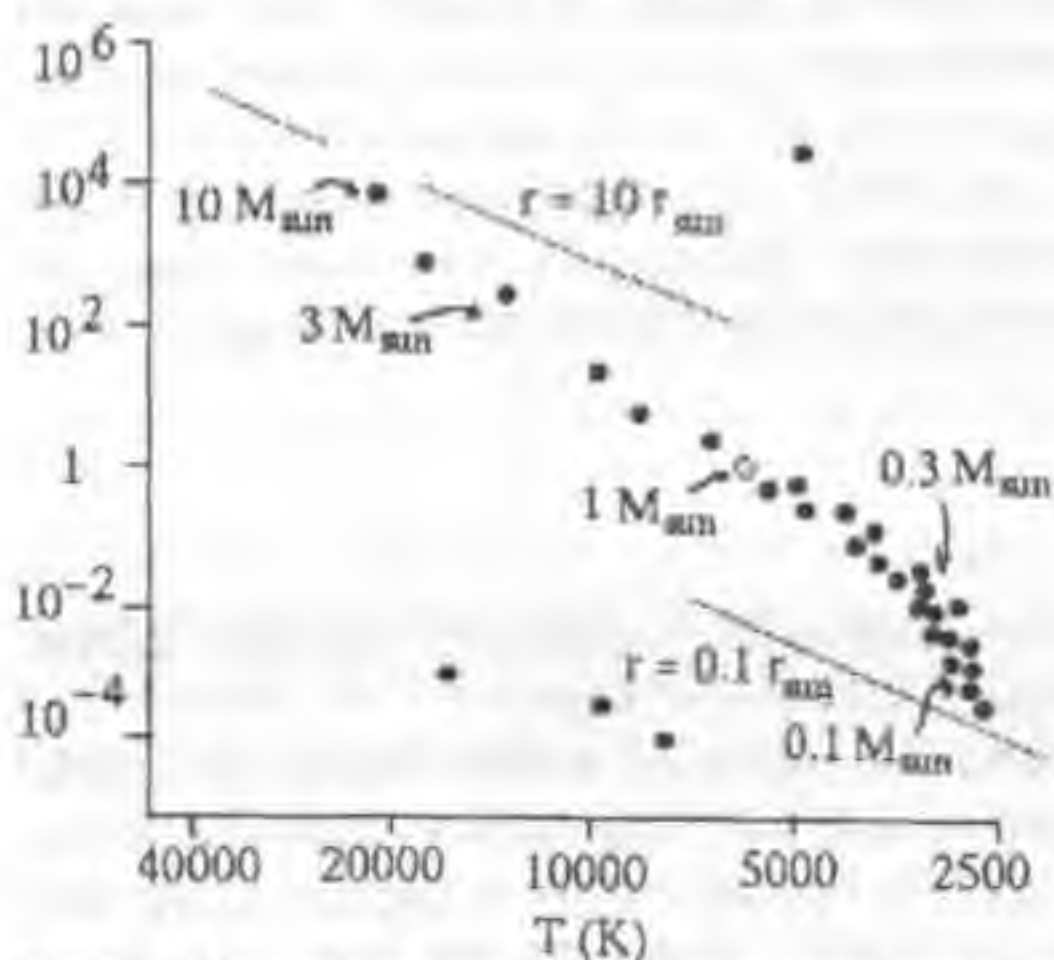
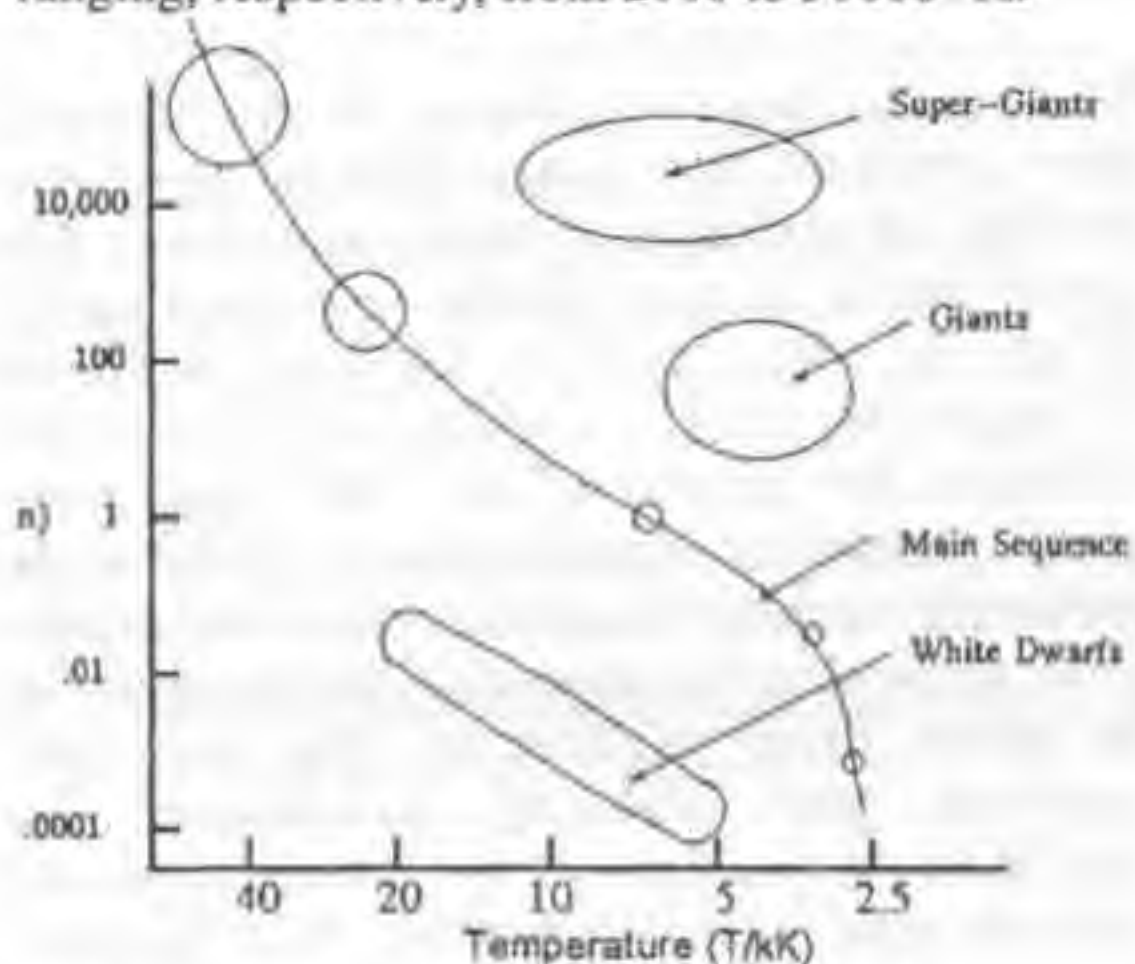


Fig. 2. Schematic illustration of main-sequence sections in the HR diagram, including the position of the Sun (right panel).

The most obvious specific characteristics of a star are respective surface temperature T_s , luminosity L , and radius R . The former two are accessible to observation, but the radius is generally not. Yet a relationship between these properties can be easily specified. Pretending the stars radiate as black bodies, the energy emission rate per unit surface area is given by the Stefan-Boltzmann black-body radiation law, σT_s^4 , with the constant $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-5}$ ergs/K⁴/s/cm². Thus the star's luminosity is given by $L = 4\pi R^2 \sigma T_s^4$. Normalizing observables to solar properties this relation can be rewritten as

$$\frac{L}{L_{\text{solar}}} = \left(\frac{R}{R_{\text{solar}}} \right)^2 \left(\frac{T_s}{T_{\text{solar}}} \right)^4.$$

Though this result is true only for a blackbody, it makes it plausible that a plot of luminosity versus temperature might yield a one-dimensional path in the plane parameterized by the radius. For example, given a class of stars radiate according to the Stefan-Boltzmann law, their characteristics $\{T_s, L, R\}$ would follow the trajectory as described above.

This was basically the discovery of Hertzsprung and Russell. The HR diagram in Fig. 2 shows a dominant trajectory - the main sequence - running from high temperature to low temperature. It also shows other classes of stars that reside well off the main sequence. The Sun is situated on the main sequence according to observed solar surface temperature of about 6500 K. Stars at the upper left, i.e., on the main sequence with temperatures 4 times that of the sun and luminosities 6 orders of magnitude larger, would have a radius about 60 times that of our Sun. The red, cool, dwarf stars in the lower right of the main sequence, with luminosities about 2000 times lower than the one of the Sun and temperature about a half of the solar one, have radii about 0.1 that of the sun. Other classes of stars are well separated from the main sequence. One group has luminosities on the order of 10^4 and temperatures again about a half from that of the Sun. Thus these supergiants would correspond to a radius about 400 times that of the sun. Red giants, which form another patch off the main sequence, have a radius about 50 times that of our sun. White dwarfs - with luminosities about 1/200 of solar and temperatures twice solar - would correspond to a radius of about 1/50th that of the sun. These objects sit well below the main sequence.

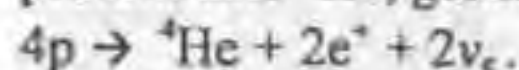
3. The standard solar model and the pp chain.

We consider now the stars burning hydrogen through the pp and the CNO cycles, such as the Sun and similar stars. Almost all stars lying along the main sequence (perhaps 80% of the stars observed) are thought to be hydrogen burning. Evidently, the Sun gives our "test case" for developing a theory of main-sequence stellar evolution. We know far more about this star, e.g., the age, luminosity, radius, surface composition, and even its neutrino luminosity and helioseismology, than any other star. Solar models trace the evolution of the sun over the past 4.6 billion years of main sequence burning, thereby predicting the present-day temperature and composition profiles of the solar core that govern energy production. Standard solar models share four basic assumptions:

- The sun evolves in hydrostatic equilibrium, maintaining a local balance between the gravitational force and the pressure gradient. To describe this condition in detail, one must specify the equation of state at various compositions.

- Energy is transported by radiation and convection. While the solar envelope is convective, radiative transport dominates in the core region where thermonuclear reactions proceed. The opacity depends sensitively on the solar composition, particularly the abundances of heavy elements.

- Thermonuclear reaction chains generate solar energy. As is considered within the standard model this energy is produced from the conversion of four protons into ${}^4\text{He}$, generally, written as



About 98% of this synthesis occurs through the pp chain, with the CNO cycle contributing the remaining 2%. The sun is a large but slow reactor since the core temperature $T_c \sim 1.5 \cdot 10^7 \text{K}$ results in typical center-of-mass energies for reacting particles of $\sim 10 \text{keV}$, much less than the Coulomb barriers suppressing charged particle nuclear reactions. Thus reaction cross sections are small, and one should probe significantly higher energies before laboratory measurements are feasible. These laboratory data must then be extrapolated to the solar energies of interest.

- The model is constrained to produce today's solar radius, mass, and luminosity. An important assumption of the standard model is that the sun was highly convective, and therefore uniform in composition, when it first entered the main sequence epoch. It is further presumed that the surface abundances of metals (nuclei with mass numbers $A > 5$) were undisturbed by the subsequent evolution providing, thereby, a record for the initial solar metallicity. The remaining parameter is the initial ${}^4\text{He}/\text{H}$ ratio, which is adjusted until the model reproduces the present solar luminosity after 4.6 By of evolution. The resulting ${}^4\text{He}/\text{H}$ mass fraction ratio is typically 0.27 ± 0.01 , which can be compared to the big-bang value of 0.23 ± 0.01 .

The emerging "standard solar model" describes the evolving Sun. Predominant component in the energy emerges from the pp chain. There is clearly no strong or radiative capture reaction that can initiate ${}^4\text{He}$ synthesis in the sun. The $p+p$, $p+{}^4\text{He}$, and ${}^4\text{He}+{}^4\text{He}$ reactions do not release energy and thus do not form bound states. The driving reaction of the pp chain is governed by a weak interaction

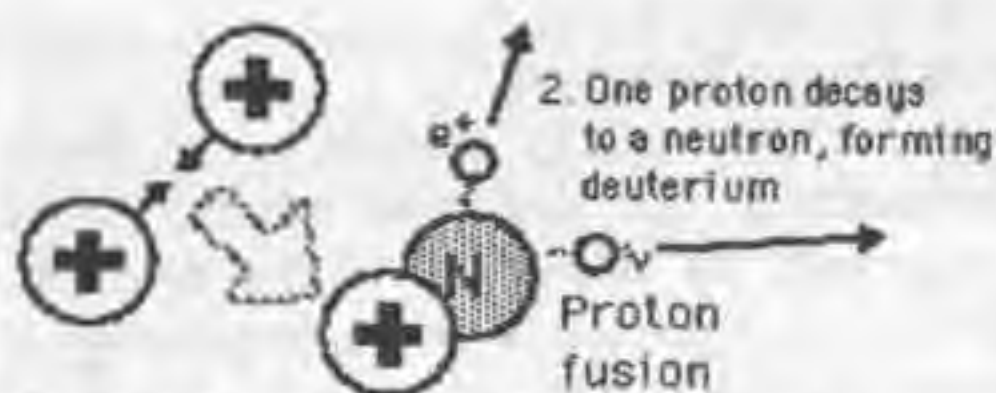
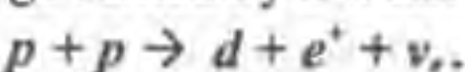


Fig. 3. Schematic view of pp-fusion process.

This is analogous to neutron or nuclear decay, except that the initial state is not given as a nucleus, but as two protons in a plasma. The cross section is very small, about 20 orders of magnitude below the strong interaction S-factors, and cannot be measured in the laboratory. Thus our description of the basic process that powers the majority of stars has to be taken from first principles nuclear theory calculations. As is believed this can be done to an accuracy of about 1% to give the astrophysical factor

$$S_{pp} = 0.41 \times 10^{-21} \text{ keV barns}$$

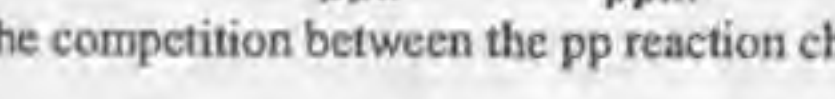
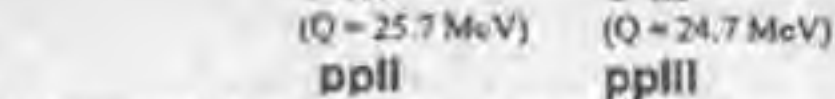
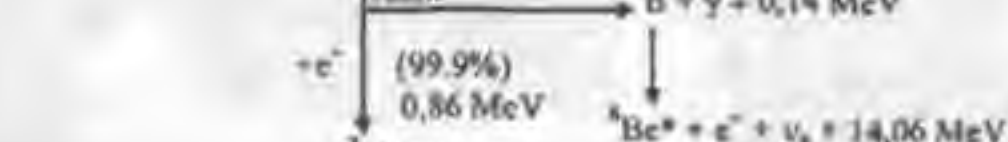
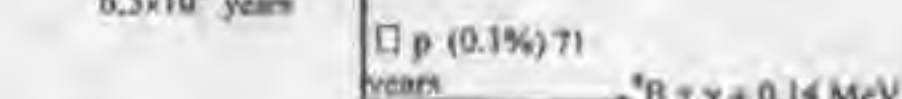
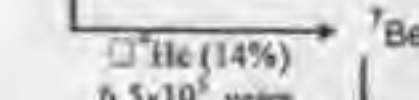
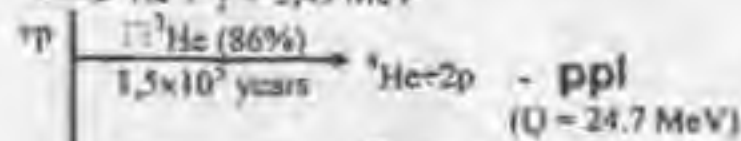
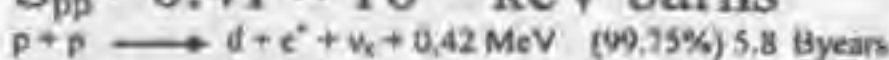
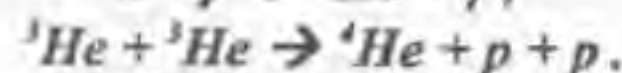
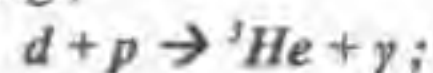


Fig. 4. The competition between the pp reaction chains.

In the core of the sun, at temperature $T_c \sim 15 \text{MK}$ and proton density $3 \times 10^{25} / \text{cm}^3$, the $p+p$ reaction rate can be calculated to give $r_{pp} \sim 0.6 \times 10^8 / \text{cm}^3 / \text{sec}$. Therefore, the time scale for burning hydrogen is the number density divided by twice the burning rate (two protons are consumed per reaction) and calculated to be $t_{\text{sun}} \sim 7.9 \text{By}$. It can be compared to the sun's present age, 4.55 By, or about half its lifetime.

Once the initiating $p+p$ decay reaction occurs, we can see relatively easily how the rest of the burning might proceed, e.g.,



This is so-called the ppI cycle making, indeed, the most robust part of the pp chain in stars with nearly solar temperatures. About 90% of ${}^4\text{He}$ produced today in the solar core is predicted to be synthesized in this way. Somewhat less important branches for

the pp chain are shown in Fig. 4.

3.1 Nuclear Fusion Reactors.

For potential nuclear energy sources at the Earth based environment, the deuterium-tritium fusion reaction contained by some kind of the magnetic confinement, e.g., Tokamak shown schematically in Fig. 5, seems the most likely path. At the fusion of deuterium and tritium the reaction yields about 17.6 MeV of energy release but requires a high temperature (of about million Kelvins) to overcome the Coulomb barrier and ignite the fuel. The deuterium fuel component is naturally abundant, but tritium must be either bred from lithium or gotten in the operation of the deuterium cycle. It is worthy to recall in this regards the famous International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER) project aiming to demonstrate the scientific and technical feasibility of fusion power.



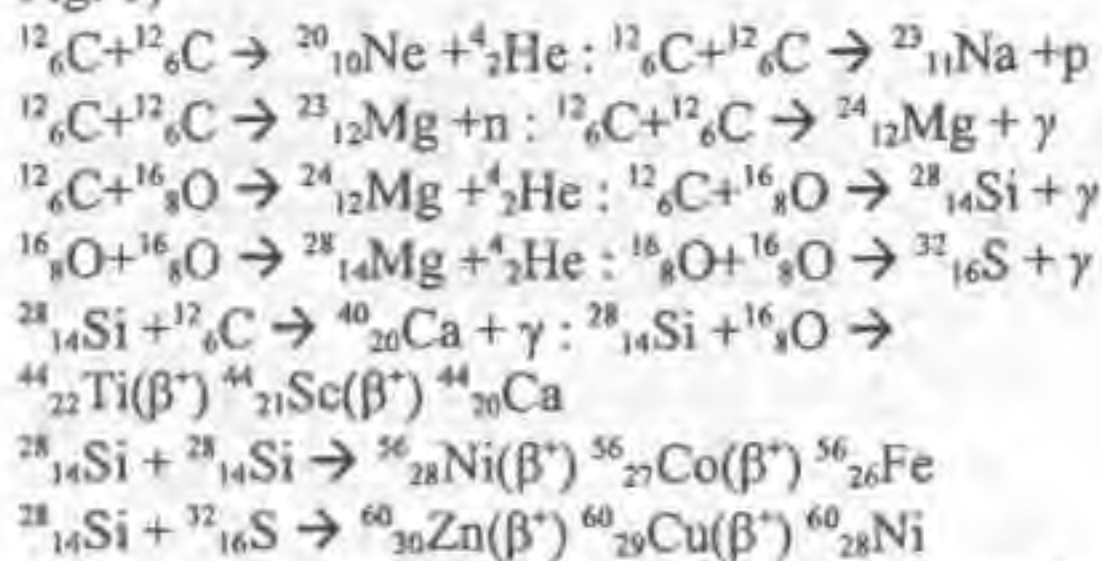
Fig. 5. Schematic view of Tokamak.

3.2 Hydrostatic Burning in Massive Stars

We come to a massive star, in excess of 10 solar masses, burning the hydrogen in its core under the conditions of hydrostatic equilibrium. When the hydrogen is exhausted, the core contracts until the density and temperature rise to stimulate noticeable $3\alpha \rightarrow {}^{12}\text{C}$ process. The ${}^4\text{He}$ comes then over etc. The pattern, i.e. fuel burned to exhaustion, contraction, and ignition of the ashes from the previous burning cycle repeats several time (cf. Fig. 6), leading finally to the explosive burning of ${}^{28}\text{Si}$ to Fe. For a heavy star, the evolution is rapid: the star has to work harder to maintain the hotter electron gas necessary to sustain itself against its own gravity, and therefore consumes its fuel faster. Likewise, as the star contracts to higher density after each burning stage, and because the energy liberated in late-stage

burning cycles is modest (cf. Fig. 1), the evolution accelerates as the star progresses to later stages. A 25 solar mass star would go through all of these cycles in about 7 My, with the final explosion Si burning stages taking a few days. The resulting "onion skin" structure of the precollapse star is shown in Fig. 6. Note that one can read through the nuclear history of the star by going from the surface and outer skin inward.

The reaction sequences are the following (cf. Fig. 6)



Once the Si burns to produce Fe, there is no further source of nuclear energy adequate to support the star. So as the last remnants of nuclear burning take place, the core is largely supported by degeneracy pressure, with the energy generation rate in the core being less than the stellar luminosity. The core density is about $2 \cdot 10^9$ g/cc and the temperature is $kT \sim 0.5$ MeV.

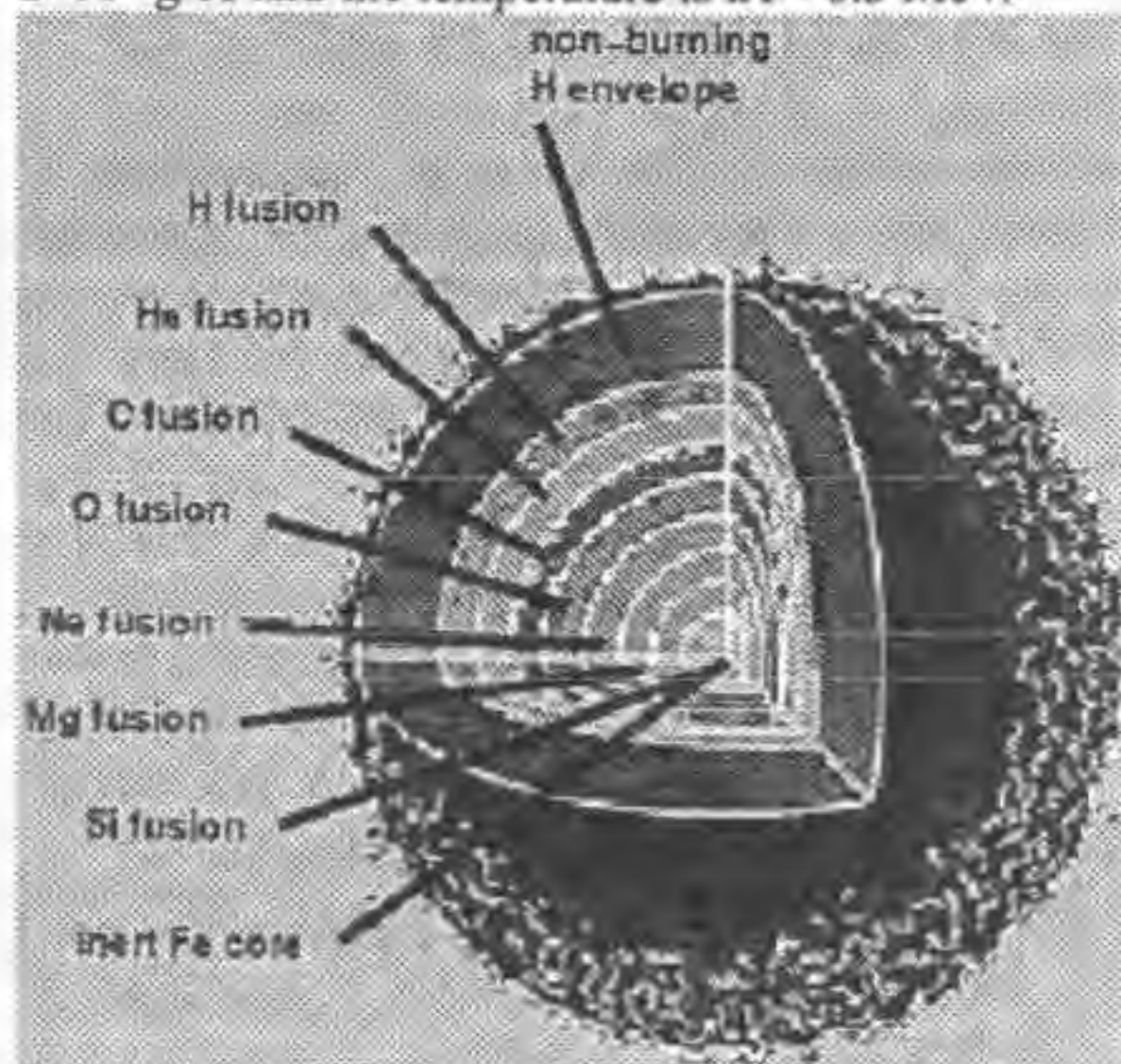
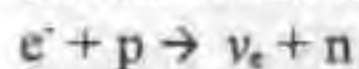


Fig. 6. The view of onion structure of massive stars.

4. Core-collapse Supernovae.

As is pointed out in sect. 3.2 the gravitational collapse that begins with the end of Si burning is not halted by a new burning stage, but continues. As gravity does work on the matter, the collapse leads to a rapid heating and compression of the matter. As the nucleons in Fe are bound by about 8 MeV, sufficient heating can release γ s and a few nucleons. At the

same time, the electron chemical potential is increasing. This makes favorable the electron capture on nuclei and any free protons, i.e.



While the chemical equilibrium is reached, an equality for chemical potentials reads

$$\mu_e + \mu_p = \mu_n + \langle E_\nu \rangle$$

Therefore, the fact that neutrinos are not trapped plus the rise in the electron Fermi surface as the density increases, lead to increased neutronization of the matter. The escaping neutrinos carry off energy and lepton number. Both the electron capture and the nuclear excitation and dissociation take energy out of the electron gas, which is the star's only source of support. This means that the collapse is very rapid. Numerical simulations find that the iron core (~1.2-1.5 solar masses) of the star collapses at about 0.6 of the free fall velocity.

In the early stages of the infall the ν_e s readily escape. But neutrinos are trapped at a density of $\sim 10^{12}$ g/cm³. At this point the neutrinos begin to scatter off the matter through both charged current and coherent neutral current processes coming to a "random walk" out of the star core. When the neutrino mean free path becomes sufficiently short, the "trapping time" of a neutrino begins to exceed the time scale for the collapse to be completed. This occurs at a density of about $\sim 10^{12}$ g/cm³, or somewhat less than 1% of nuclear saturation density. After this point, the energy released by further gravitational collapse and the star's remaining lepton number are trapped within a proto-neutron star. If we take the respective neutron star mass M of 1.4 solar masses and a radius R of 10 km, a rough estimate of its binding energy

$$\text{gives the value } \frac{GM^2}{2R} \sim 2.5 \times 10^{53} \text{ ergs. This is}$$

roughly the trapped energy that will be later on radiated in neutrinos.

The collapse of the homologous core continues until densities reach nuclear saturation values. Nuclear matter is rather incompressible ($K \sim 200$ MeV/fm³). While the innermost shell of a star is compressed to densities of 3-4 times of normal nuclear density (e.g., perhaps $6 \cdot 10^{14}$ g/cm³) it first rebounds sending a pressure wave out through the homologous core. This wave travels faster than the infalling matter, since the homologous core is characterized by a sound speed in excess of the infall speed. Subsequent shells follow to be heated up. The resulting series of pressure waves collect near the sonic point (the edge of the homologous core). As at this point density attains the nuclear saturation numbers and comes to

rest, a shock wave breaks out and begins its traversal of the outer core. Thus, the shock wave forms at the boundary of the homologous core, i.e. at the point where supersonic becomes subsonic.

The shock wave melts the iron core and stalls in the outer iron core, before it reaches the point just outside the iron core where the shock can (in principle) deliver enough energy to the matter to lift it off the star. Note that the supernova problem is entirely one of energy transfer: all matter in the star was initially bound. Thus the energy released by the core in falling deep into a gravitational potential must be transferred to the mantle as to create an explosion. As a matter of fact mechanism of sufficiently efficient energy transfer remains an open problem. Dissipation due to shock wave heating of matter and neutrino emission reduces to negligible numbers the efficiency of energy transfer by the shock wave. So that the mechanism of SN explosion is not understood.

4.1 Convection and Magnetization

A current large-scale computing grand challenge is 2D modeling [2] to explore a possibility that convection might help to achieve explosions. Substantial evidences from SN1987A and other supernovae (e.g., explosion asymmetry, early emission of x-rays and γ rays, and outward mixing of ⁵⁶Ni) point to an occurrence of convective dynamics during supernova events. This specific feature is strongly corroborated by numerical simulations [2] indicating the development of strong convection when high-entropy material, heated up from central core by neutrinos, rises and is replaced by cool matter from upper layers. Such violent convection results in magneto-rotational instabilities and/or dynamo-action bringing enormous amplification of stellar magnetization. Assuming that predominant energy component of shock wave E_s originates from the magnetic pressure for the field strength B one gets $\langle B^2 \rangle R_v^3 \Delta R \sim 2E_s$. Given that 1% of the total energy contributes to the matter explosion for $R_v \sim 40$ km and $\Delta R \sim 10$ km we find $B \sim 10^{19} - 10^{20}$ G. Therefore, magnetic fields of strengths ranging up to hundred of *tera-tesla* represent plausibly an inherent feature of this spectacular astronomical phenomenon. Such a *magnetar* concept is strongly corroborated by numerous observations of soft gamma repeaters (SGRs) and anomalous X-ray pulsars (AXPs). These fields can, in fact, modify the structure of atomic nuclei [3] and give urgency to analyze possible magnetic effects in nuclide transformations. Incorporating such field effects in an analysis of

nuclear reaction network may provide more insights on neutron stars and supernovae, e.g., magnetodynamics at neutron star crusts formation.

5. Explosive nucleosynthesis

The explosion of a core-collapse supernova leads, nevertheless, to ejection of the star's mantle, and thus to substantial enrichment of the interstellar medium with the major burning products of hydrostatic equilibrium: ^4He , ^{12}C , ^{16}O , ^{20}Ne , etc., some among the most plentiful elements in nature. In this section we describe several nucleosynthesis mechanisms associated with the explosive conditions of a supernova (i.e., the e-, s- and r-processes) while paying particular attention for magnetic effects.

Explosive nucleosynthesis denotes, therefore, the creation of elements by the explosion itself. The properties of this process are tied to those of the supernova event, which are still poorly understood, cf. Sect. 4. But the observation that the kinetic energy of a supernova explosion is typically in the range of $(1-4) \cdot 10^{51}$ ergs, provides an important constraint.

5.1 Nuclear composition of ultramagnetized stellar media.

The nuclear statistical equilibrium (NSE) approximation in the theory of synthesis of chemical elements is used very successfully for the description of abundance of atomic nuclei with the greatest binding energy (i.e. transition metals of iron group and nearby nuclides) for over half a century. The magnetic field leads to an increase of nuclear reaction (transformation) rates [4] and, accordingly, to an acceleration of an establishment of statistical equilibrium. Therefore, we employ such an approach to consider an influence of magnetic fields on nuclide formation processes in stars. The detailed description of NSE model is widely presented in the literature, cf. [5]. Therefore, we recall here just basic steps, amendments, modifications and additions to NSE due to presence of a magnetic field.

Statistical equilibrium represents a condition of entropy S extreme $TdS = \sum_i \mu_i dY_i = 0$, indicating,

thereby, that an abundance of the i th nuclear particle Y_i at a temperature T is determined by the respective nucleon chemical potential μ_i .

The thermodynamic formalism based on implications of self-consistent mean field approach for an analysis of barion magnetism has been already described [3-5]. We just remind that at magnetic field strengths ($H \leq 10^{14}$ T) and temperatures ($T : 10^9$ K) the portion of chemical elements Y is mainly

determined by binding energy B of corresponding atomic nuclei through the Saha equation $Y \propto \exp\{-B/T\}$.

The magnetization of stellar media brings, however, a sensitivity of nuclide creation processes to a projection of respective magnetic moment on the field direction. When accounting for thermal fluctuations of the spin projection on the field vector the dependence of relative output for nucleosynthesis products ($y = Y(H)/Y(0)$) on magnetic field strength H is defined by a change of binding energy $\Delta B = B(H) - B(0)$ in the field and magnetic components in the partition function G . With exponential accuracy this ratio can be written as

$$y : G_n^{-N} G_p^{-Z} G_i \exp\{\Delta B/kT\} \quad (\text{SE})$$

Here the spin-magnetic part in the partition function is represented by $G_i = \sum_M \exp\{g_i M \omega_L / kT\} / (2I_i + 1)$

and is determined by an energy for an interaction of magnetic field with the magnetic moments of atomic nuclei $i = {}^A_Z$ with spin I_i , free N neutrons and Z protons, $g_{n(p,i)}$ gives g -factor of a neutron (proton, atomic nucleus), and $\omega_L = \mu_N H$ with a nucleon magneton μ_N . Two possible spin projections on a quantization axis for nucleons lead to relatively simple form $G_N = \cosh[g_N \omega_L / 2kT]$, while nucleon aggregates require explicit calculations.

5.1.1. Structure of magnetized atomic nuclei.

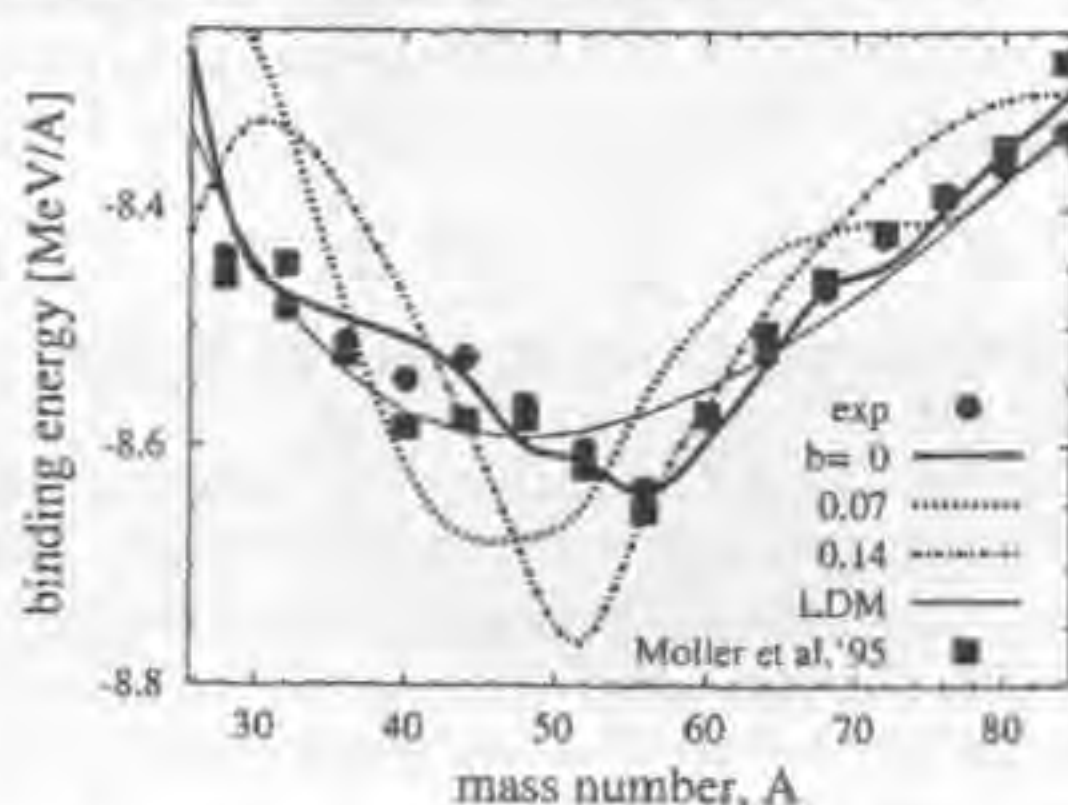


Fig. 7 Binding energy of even-even symmetric ($N=Z=A/2$) nuclei in the iron region. Thin and thick solid lines represent results of liquid drop model (LDM) without and with accounting for shell corrections [1]. Circles and squares illustrate experimental data and calculations by P.Moller et al. [6]. Dotted and dashed-dotted lines show the results when taking into account modification of shell corrections because of magnetic fields $b = 0.07$ and 0.14 , accordingly.

As is shown [3] shell effects dominate for atomic nuclei at considered magnetic field strengths. We recall here, that within the Hartree self-consistent mean field approach the single-particle energy levels determine the shell corrections. Applications of the Nilsson model are very successful in understanding of many properties of stable nuclei in the region of average mass numbers A : 10 - 100. Employing such a model one incorporates the harmonic oscillator (HO) spectrum of a frequency $\omega_0 \approx 41/A^{1/3}$ MeV and accounts for the spin-orbit splitting of energy levels with a gap $\eta_{so} \approx 0.12$ (in units ω_0).

Spin magnetization of Pauli type dominates for the neutron magnetic reactivity. Interaction of a field and the spin-magnetic moment corresponding to a spin projection m_n on a field vector gives rise to linear shift of energy levels $\Delta = m_n g_n \omega_L$. It results in a phase shift for a dependence of shell energy on neutron number. Magnetic response of protons is represented by a superposition of field interaction with spin and orbital magnetic moments. The presence of spin-orbit interaction results in abnormal dependence of proton shell correction energy on field strength. For instance, when the value of parameter $h = \omega_L / \omega_0$ approaches the strength of spin-orbit interaction η_{so} the shell oscillation amplitude can increase up to a factor 5. Apparently, as seen in Fig. 7 total shell effect due to neutron and proton contributions at field strength $h=0.07$ results in the most tightly bound nucleus of ^{44}Ti as compared to other symmetric nuclei.

5.1.2. Synthesis of ultra magnetized atomic nuclei

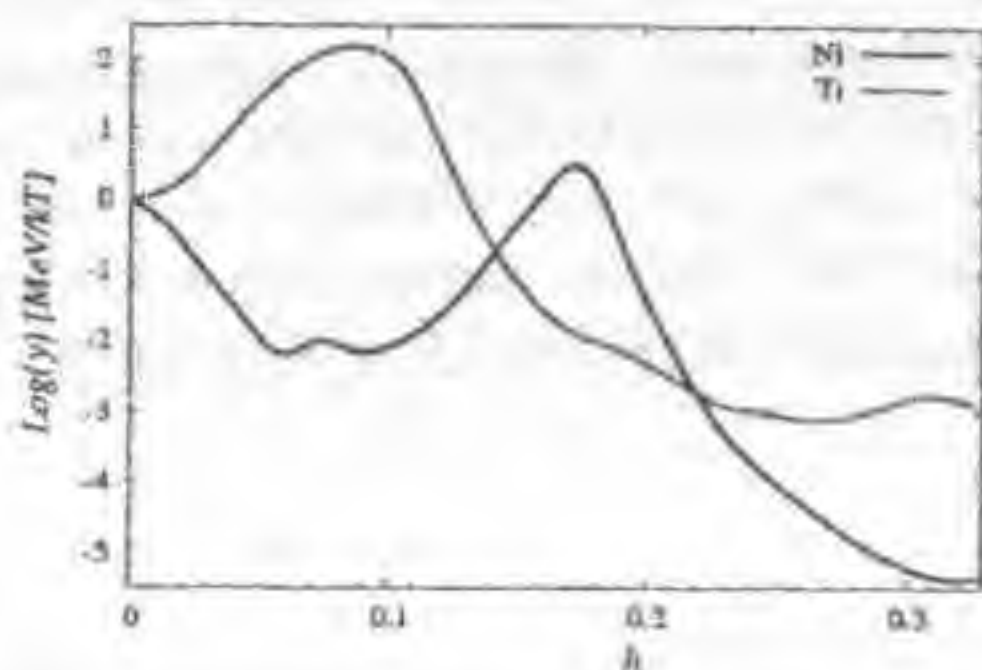


Fig. 8 Dependence on a magnetic field of relative yield $y_i = (Y_i(H)/Y_i)$ for ^{56}Ni (solid line) and ^{44}Ti (dashed line) nucleosynthesis at NSE conditions

As discussed above an influence of a magnetic field is determined by shell structure of atomic nuclei. Thus, identifying magnetic field dependence of

binding energy $\Delta B(H)$ with a change of shell correction energy C (i.e. $\Delta B; C(H) - C(0)$) and using Eq. (SE) we examine some features of nuclide composition in ultra-magnetized astrophysical plasmas. The observations suggest that for nucleosynthesis NSE meet conditions of β -equilibrium with an equal amount of protons and neutrons (i.e. $Y_p = 0.5$). Consequently, production of symmetric ($N = Z$) nuclei prevails. Therefore we consider relative outputs of nucleosynthesis products on an example of ^{56}Ni and ^{44}Ti often used for testing the supernova models. Apart from practical importance such a choice of symmetric atomic nuclei, double magic and anti-magic in the Earth based laboratory, gives a transparent picture for an influence of magnetism on processes of formation of chemical elements with fundamental consequences on the nature of transmutation and synthesis of nuclides in superstrong magnetic fields.

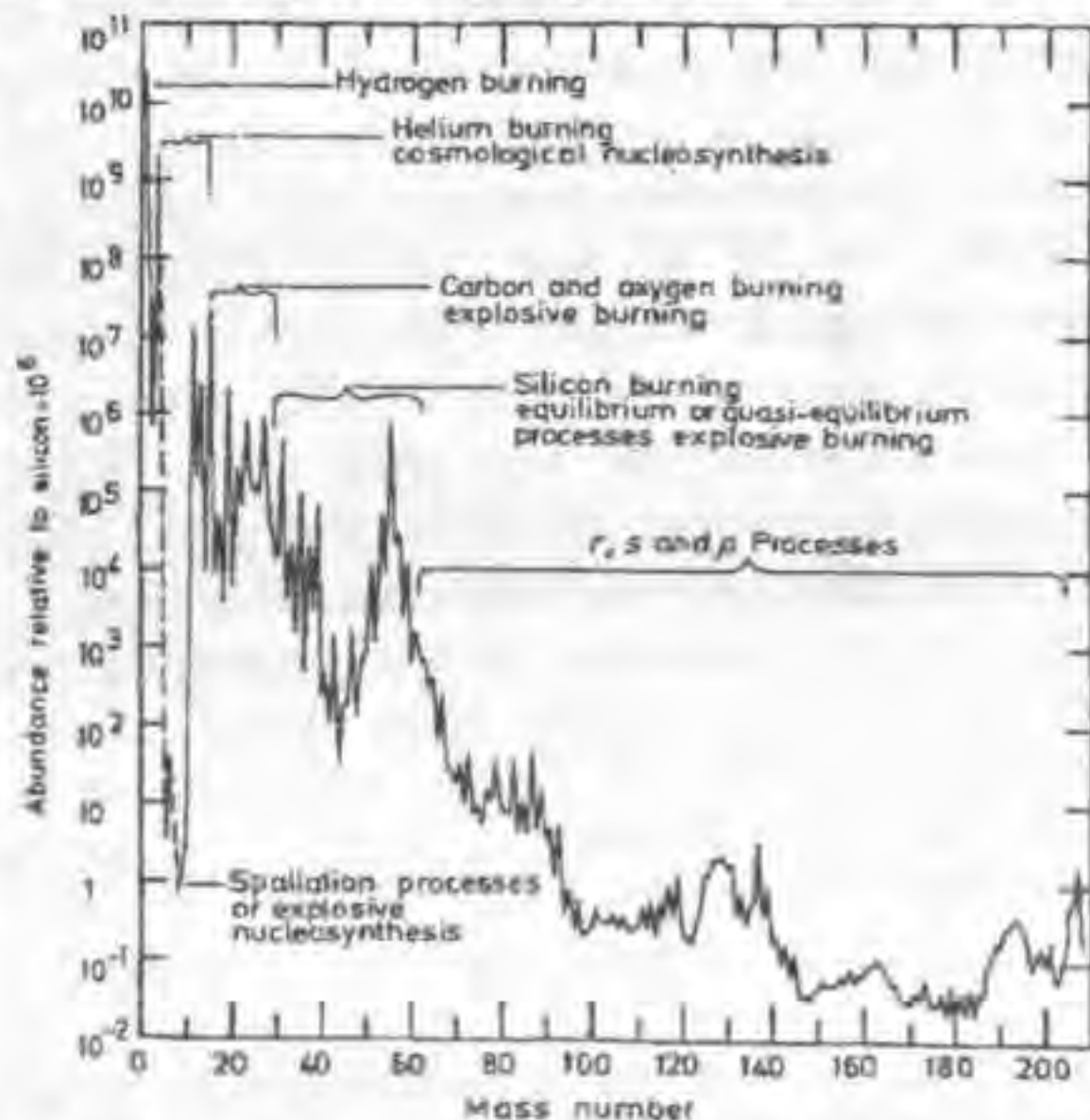


Fig. 9 Solar abundance

As is evident from Fig. 8 oscillations of nuclide yields as a function of field strength represent perhaps the most interesting magnetic phenomenon. Change in the nuclear level structure caused by magnetic field results in rather different field dependence of relative abundance for ^{56}Ni and ^{44}Ti . Considering an increasing strength H in the range of relatively "weak" fields the production of ^{56}Ni is significantly suppressed, while the total volume of ^{44}Ti grows. Such a behavior is connected with magic-anti-magic switching in nuclear shell structure in a variable magnetic field. For example,

the slightly anti-magic in laboratory nucleus of ^{44}Ti corresponds to growing binding energy at increasing field strength and becomes a magic nucleus at $h=0.07$, cf. Fig. 7. At the same time for nucleus of ^{56}Ni , double magic at the Earth conditions, the contribution of shell energy at such "weak" fields decreases. As a result an output of ^{44}Ti considerably exceeds the yield of ^{56}Ni .

5.2 Abundances above the iron peak and neutron capture.

Figure 9 shows the abundance pattern found in our solar system. We discussed above the origin of abundant light nuclei, especially the H, ^4He , and small mass elements. The iron region is favored due to its strong binding, see sect. 5.1. Apart from the abundance peak near the iron group elements the lower abundances for heavier isotopes also display an interesting features, e.g., mass peaks around $A\sim 130$ and ~ 190 . Such a clear structure in the pattern of heavy elements is associated with the closed neutron shells in nuclear physics, i.e. the most stable configurations corresponding to the magic numbers $N=50, 82$, and 126 . Splitting of the abundance peaks suggest a presence of at least two contributing processes. The integrated abundance above the iron peak is not large, comparable to about 3% of the iron peak. Thus the responsible processes are reasonably rare.

This synthesis is associated with the neutron-capture reaction, (n, γ) . The neutron sources emerge in stellar interiors, while neutron capture cross sections on heavy nuclei can be relatively large. As we see in following sections the observed shell structure naturally arises for such a process. Unstable but long-lived neutron-capture products, such as technetium, are observed in the atmospheres of red giants, indicating, thereby, an occurrence of neutron-induced synthesis in the cores of existing stars (and then dredged up to the surface).

Mechanisms for synthesizing heavy nuclei by capturing neutrons one at a time are represented by the s- and r-processes.

5.3 The s-process.

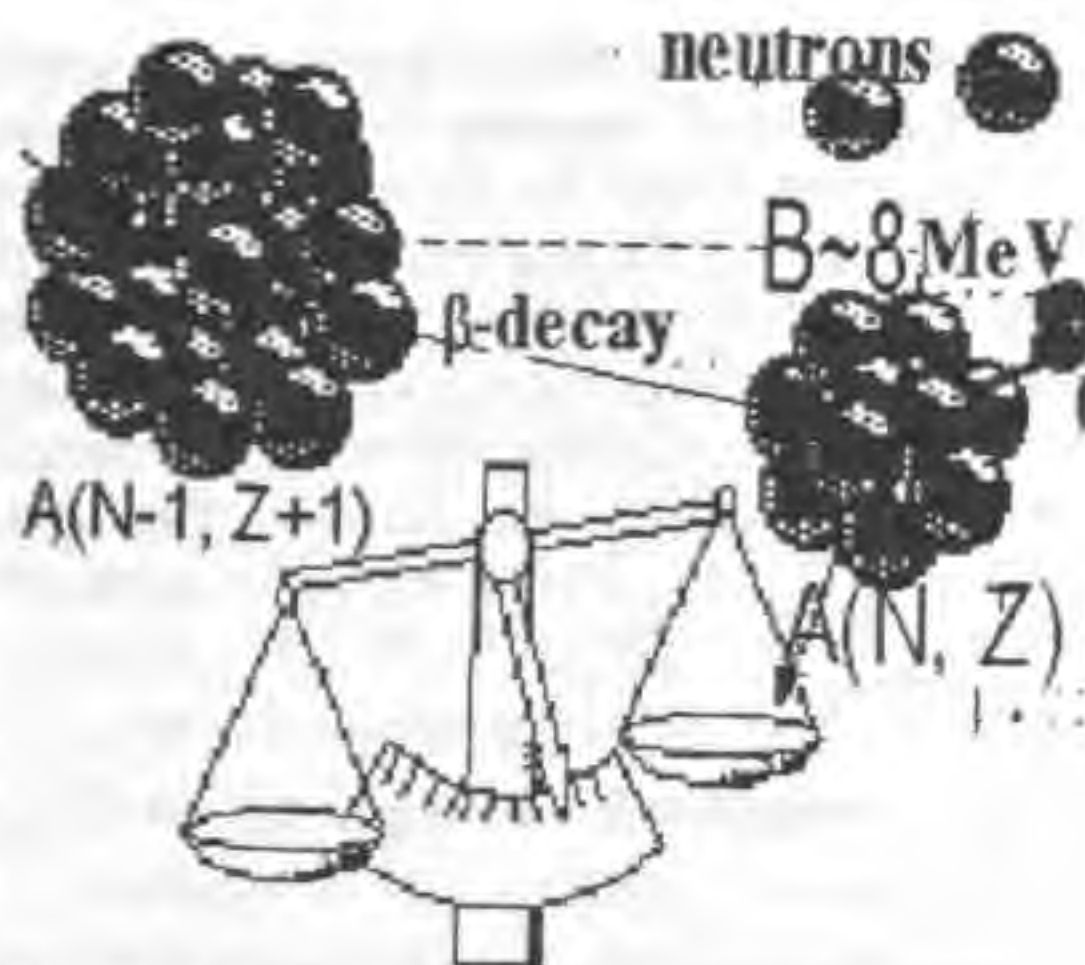


Fig. 10. Schematic view of the s-process sequence.

For the s-process the neutron capture proceeds in plasma containing neutrons and heavy seed nuclei at condition when the neutron capture rate is much slower than the typical β -decay rate. It brings then several consequences: 1) The weak interactions are then fast and maintain the Z-N equilibrium: Every time when a neutron is captured, the resulting system of $A+1$ nucleons has an opportunity for beta-decay to a nucleus of greater stability once such a nucleus exists, cf. Fig. 10.

2) The rate of synthesis is then proportional to the rate of neutron capture. The (n, γ) reactions control the "mass flow" to heavier nuclei. 3) The path of nucleosynthesis, due to point (1) above, proceeds along the so-called "valley-of-stability" on nuclear binding energy chart. These are the familiar nuclei studied in the Earth based laboratories.

It is easy to quantify the "slowness" of the s-process. The β -decay rates along the valley of stability are in the range of seconds to years. If one takes an average (n, γ) cross section of 0.1b at 30 KeV (corresponding to a neutron velocity of $0.008c$), the reaction rate per particle pair is evaluated to give $\langle\sigma v\rangle \approx 2.4 \cdot 10^{-17}\text{ cm}^3/\text{s}$, and the capture rate per heavy nucleus is obtained by multiplying this by the neutron number density N_n . Thus if we require $\tau_{(n,\gamma)} \geq 10\text{ y} \Rightarrow N_n \leq 10^8\text{ neutrons/cm}^3$. While

maintained for 2000 years, such a neutron density could synthesize $A\sim 200$ nuclei from iron group seeds.

One can also offer arguments to place a lower bound on the required neutron density. No stable nucleus exists at $N=61$: there is, however, a long-lived isotope ^{107}Pd with half life $\sim 7 \cdot 10^6\text{ y}$.

Thus if the neutron capture rate is too slow, ^{107}Pd will decay to ^{107}Ag , and neutron capture will then produce the stable nucleus ^{108}Ag . The nucleus ^{108}Pd will be bypassed. We conclude that neutron capture must be fast enough to synthesize ^{107}Pd in the s-process, and get the low limit $N_n > 10^2 \text{ neutrons/cm}^3$. This neutron number density then permits ^{108}Pd to be produced by guaranteeing neutron capture is faster than the beta-decay in this case.

To quantify an abundance N_A of s-process nuclides we take the predominance of β -decay once the channel is open and a constant neutron exposure $N_n(t) = N_n$. Then defining an average cross section $\langle \sigma v \rangle \equiv \sigma_A \langle v \rangle$ over the Maxwell-Boltzmann distribution of relative velocities, the equation describing the mass flow in the s-process reads

$$\frac{dN_A}{d\tau} = \langle v \rangle N_n \left[\langle \sigma \rangle_{A-1} N_{A-1} - \langle \sigma \rangle_A N_A \right]$$

For equilibrium flow the LHS is zero and $\langle \sigma \rangle_{A-1} N_{A-1} = \langle \sigma \rangle_A N_A = \text{constant}$. That is, the abundance achieved is inversely proportional to the neutron cross section. Evidently, the mass piles up at a target number with slow n-capture rate. Of course, the same argument goes through when the beta-decay is the destruction channel (and the beta-decay rate is presumably fast). The low neutron capture cross sections at the closed shells should result in mass peaks, just as observation shows in Fig. 9. It also follows that equilibrium will set in most quickly in the broad plateaus between the mass peaks since mass must pile up at the closed shells before the shell closure is breached. Thus if the neutron flux is prematurely ended, the synthesis may not have yet gone beyond, for example, the $N \sim 82$ peak.

Several sites have been suggested for the s-process, but one well accepted site is in the helium-burning shell of a red giant, where temperatures are sufficiently high to liberate neutrons by the reaction $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$, where the ^{22}Ne is produced from alpha-capture sequence on the elements which the CNO cycle left after hydrogen burning.

Evidently, the s-process cannot proceed beyond ^{209}Bi while the neutron capture on this isotope leads to a decay chain that ends up with alpha-emission. This is a gap the s-process cannot cross over. It follows that the actinides (e.g. transuranic elements) must have some other origin.

5.4 The r-process.

© V.N. Kondratyev, 2010

The s-process goes along the stability valley on the nuclear binding energy map while it is governed by β -stability. This path implies that in the valley some certain nuclei with an excess of neutrons will be missed in the s-process. Such nuclei can only be reached from the neutron-rich side requiring, thereby, another mechanism for synthesizing heavy nuclei. Such a second path proceeds through neutron-rich nuclei far from β -equilibrium conditions. Somewhat more convincing evidence is shown in Fig. 9, where the mass peaks at $A \sim 130$ and $A \sim 190$ are shown to split into two components, one corresponding to the expected s-process closed-neutron-shell peaks at $N \sim 82$ and $N \sim 126$, and the second shifted to lower numbers $N \sim 76$ and ~ 116 .

This second process named the r- (or rapid-) process is characterized by next properties. 1) The neutron capture is fast as compared to β -decay rates. Thus 2) the equilibrium is maintained for $(n, \gamma) \leftrightarrow (\gamma, n)$ component, cf. Fig. 11, i.e., neutron capture fills up the available bound levels in the nucleus until this equilibrium sets in. The new Fermi level depends on the temperature and the relative n/γ abundance. 3) The nucleosynthesis rate is thus controlled by the β -decay rate, each β^+ -transition converting $n \rightarrow p$ opens up a hole in the neutron Fermi sea allowing another neutron to be captured. 4) The nucleosynthesis path goes along exotic, neutron-rich nuclei that would be highly unstable under normal Earth based laboratory conditions.

In analogy with the s-process calculation of the previous chapter 5.3 for constant neutron exposure and equilibrated mass flow the system maintain $(n, \gamma) \leftrightarrow (\gamma, n)$ equilibrium. This condition requires a balance between the rates for (n, γ) and (γ, n) reactions for an average nucleus, i.e.

$$A + n \leftrightarrow (A+1) + \gamma.$$

Making use of the Saha equality (cf. ref. [5]) one easily obtains the relationship between temperature T and neutron separation energy B along the r-process path at the density $N_n \propto kT^{3/2} \exp\{-B/kT\}$, cf. Fig. 11.

Using the conditions $N_n \sim 3 \cdot 10^{23}/\text{cc}$ and $T \sim 10^9 \text{ K}$, we find the binding energy $B \sim 2.4 \text{ MeV}$. Thus neutrons are bound by about 30 times of kT , still small value as compared to a typical binding energy of 8 MeV for a normal nucleus. As is mentioned above the gaps exist at the magic numbers $N \sim 82$ and 126. When a shell closures gap is reached in the r-process, the neutron number of the nucleus remains frozed until the nucleus can change sufficiently to

overcome the gap, i.e., to bring another bound neutron quantum level below the continuum. Thus N remains fixed while successive beta-decays occur. In the (N, Z) trajectory, the path goes along increasing Z with fixed N . Every beta-decay is followed by an (n, γ) reaction to fill the open neutron hole, but no further neutrons can be captured until the gap is overcome.

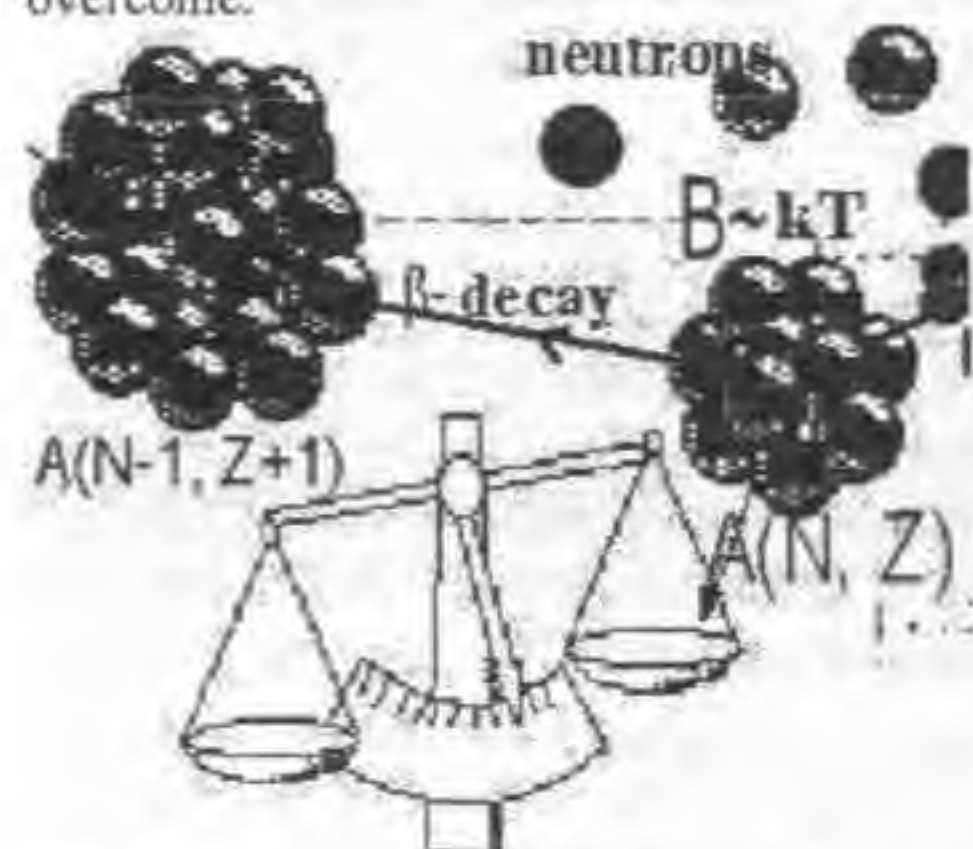


Fig. 11. Schematic view of the r-process sequence.

The closed neutron shells are called the 'waiting points', because it takes a long time for the successive beta-decays to occur and to allow progression through nuclei with larger number N . The β decays are slow at the shell closures. Just as in the s-process, the abundance of a given isotope is inversely proportional to the β -decay lifetime. As a consequence the mass builds up at the waiting points, forming the spread abundance peaks seen in Fig. 9.

With removed neutron exposure the r-process comes to end by the beta-decay bringing nuclei back to the valley of stability. This can involve some neutron spallation (beta-delayed neutrons) that shifts the mass number A to a lower value. But it certainly involves conversion of neutrons into protons, and that shifts the r-process peaks at $N \sim 82$ and 126 to a lower N . This effect is clearly seen in the abundance distribution (see Fig. 9). Therefore, the s- and r-process peaks are splitted while the broader r-peaks are shifted towards small N relative to the s-process peaks.

The sites for the r-process have been debated many years and still remain a controversial subject. It is believed that the r-process can proceed to very heavy nuclei ($A \sim 270$) and finally comes to end by β -delayed and n-induced fission, which feeds matter back into the process at an $A \sim A_{\text{max}}/2$. Thus there may be important cycling effects in the upper half of the r-process distribution. As is discussed in the next section

such a fissile chain brings an option for incineration of radiotoxic waste of nuclear powerplants.

5.5 Annealing the nuclear reactor waste.

Thus, as is discussed in previous section the r-process explosive nucleosynthesis gives, in particular, the actinides containing basic fuel for nuclear fission reactors, among others. Processing and utilization the burned nuclear fuel marks one of the most pronounced problems with the use of nuclear power today. Light water reactor waste is mainly given by the burned reactor fuel containing two major element fractions, the actinides and the fission products (FPs). The actinides include the most radiotoxic components, especially, the transuranium elements (TUEs) like plutonium and the minor actinides (MA), neptunium, americium and curium. As is indicated in Fig. 12 the radiotoxicity of TUEs remains considerable for a long time up to Myears. At the same time FPs have very short half-lives and can be disposed to the geological repository at upper level.

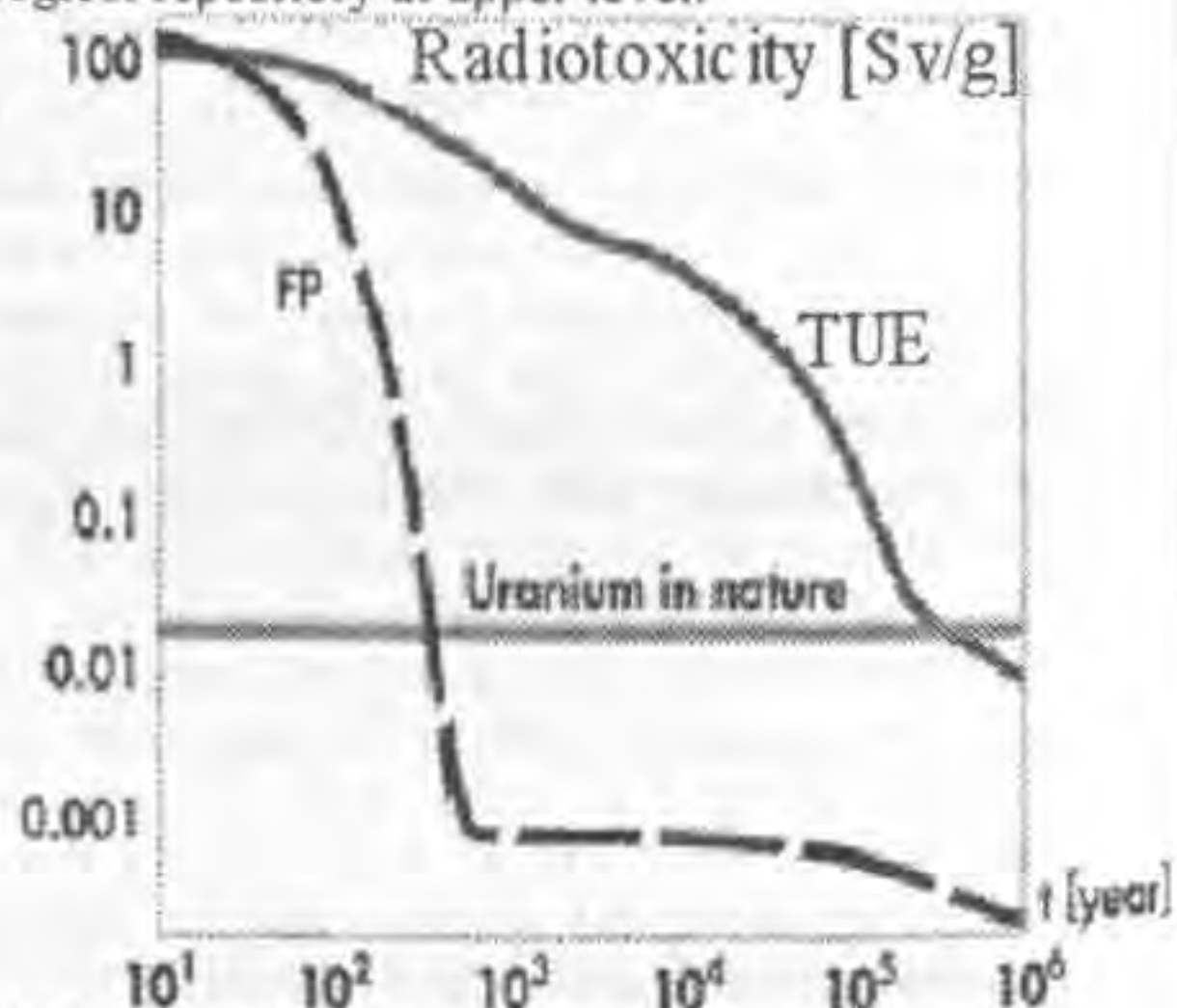


Fig. 12 Time dependence of the radiotoxicity for fission products (FPs) and transuranium elements (TUEs).

As we see in proceeding sections the neutron exposure leads to very effective transmutation of atomic nuclei. This brings an idea to operate safely the fission reactor ashes commonly called the reactor waste. The neutrons might allow for incineration and transmutation the high level radioactive materials from nuclear powerplants in order to reduce the amount of the radio-toxicity and the half-life of radio-nuclides prior disposing in a geological repository. The incineration by neutron irradiation in a critical or sub-critical assembly yields perhaps the most promising technique. The

basic principle of those concepts is to induce nuclear reactions bringing the actinides to fission while the respective fission products are farther transmuted by neutron capture to short-lived and stable species (cf. Sect. 5). The controlled neutron source represents the main component of such an instrument.

We have already mentioned the thermo-nuclear fusion reactor producing an intense energetic (14 MeV) neutron field that might be used at the first wall of a magnetic confined fusion plasma for annealing nuclear waste. However, it is unlikely to be realized within a foreseeable future.

The accelerator-driven systems (ADS) provide an opportunity for relatively well-controlled neutron exposure and, therefore, represent promising set-up for an analysis of experimental facility of this kind.

6. Nuclide radioactivity probing the internal burning region.

Radioactive nuclides synthesized at nuclear processes provide an opportunity to probe the active reaction regions. Created at the SN explosions radioisotopes can be observed by registration of characteristic gamma-lines, accompanying their radioactive transitions. The decay chain $^{44}\text{Ti} \rightarrow ^{44}\text{Sc} \rightarrow ^{44}\text{Ca}$ gives rise to the emission of lines with energies 67.9 keV and 78.4 keV (from $^{44}\text{Sc}^*$) and 1157 keV (from $^{44}\text{Ca}^*$) of approximately the same intensity. The ^{44}Ti half-life period, of about 60 years at the Earth based environment, allows to evaluate the mass of this isotope in a remnant.

region containing the Cassiopeia A SN remnant. The right bottom panel (d) represents the spectrum from the Cassiopeia A in the energy range 20–95 keV, the solid line shows the fit with the power law energy E dependence, $a E^b$.

In this work we analyze the data, accumulated by the Integral IBIS/ISGRI detector system displaying high sensitivity in region of low energy gamma-rays [7], including the $^{44}\text{Sc}^*$ gamma-lines. As is described in ref. [7] we analyze the Sciences Windows (scw) of type pointing available on a server [8]. Here we briefly remind that there have been considered 912 scw accumulated during a period from 2002 to 2008. The total effective exposure time is about 0.64 Ms. The results of the γ -ray flux for different energy intervals are shown in Fig. 13. The source geometry and position can be analyzed by fitting the flux intensity distribution, e.g., with a two-dimensional elliptical Gaussian with the following parameters: the background level, the direction and the value of the maximal flux, the widths for two axes, and the ellipse rotation angle.

The obtained values of the center position and widths confirm an observation of Cassiopeia A SN remnant with respective equatorial coordinates (J2000) are R.A. 350.8664° , decl. 58.8118° .

Since the considered rare effects slightly exceed the detector sensitivity level, we employ the statistical analysis to determine the signal significance of the ^{44}Sc γ -decay in the Cassiopeia A. The detection limit ρ_n can be calculated with the formula

$$\rho_n = (k_{1-\alpha} + k_{1-\beta}) \sqrt{r_0 \frac{1}{t_b} + \frac{1}{t_0}}$$

where $k_{1-\alpha}, k_{1-\beta}$ denote fractiles of the normal distribution, r_0 gives the background intensity, and t_b, t_0 represent time intervals of the signal with background and background measurements, respectively, see [7]. The periods of both measurements are equal in our case and given by the duration of data collection $t_b = t_0 = 637.6$ Ks. The error of the detection limit is represented as [7]

$$\Delta \rho_n = \frac{(k_{1-\alpha} + k_{1-\beta})}{2} \sqrt{\frac{2}{t_b r_0}} \Delta r_0$$

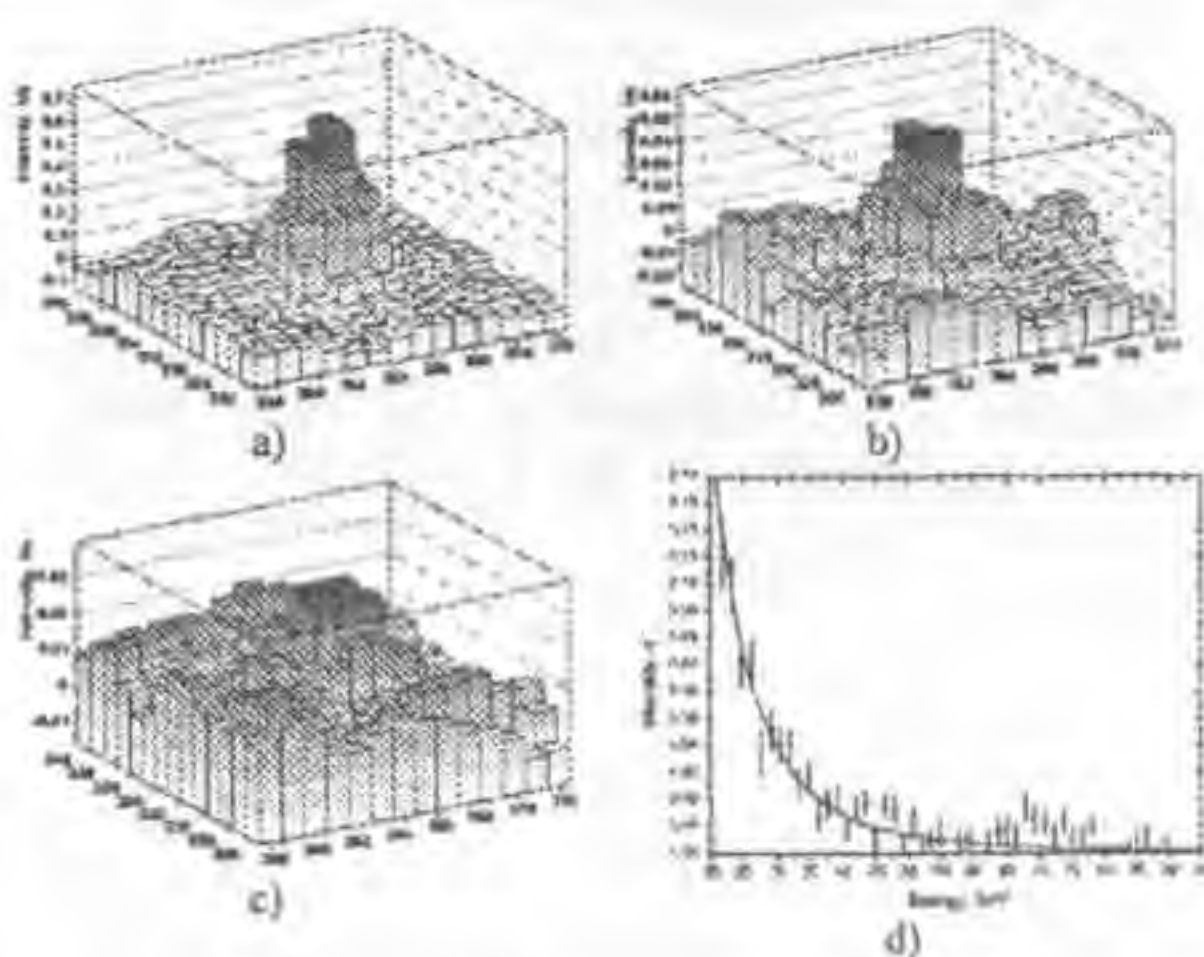


Fig. 13. The direction (i.e., pixel number) dependence of the registered gamma-ray flux at different energy ranges: 20–62 keV-a, 62–72 keV-b, 72–82 keV-c; for the angle © V.N. Kondratyev, 2010

Here Δr_0 denotes the background intensity error. In our calculations we used fractile values corresponding to the confidence level C.L.=95%.

The background flux can be well fitted with the power law spectral function $\alpha \cdot E^b$ (cf. Fig. 5c) as is justified by various models and observations. Then the background intensity is determined by integrating the flux fit data in the energy range from 59.9 keV to 84.3 keV. This interval corresponds to the detector energy resolution and gives, thereby, the whole intensity value of signal+background calculated as a sum over the channels in the respective energy range. Then subtracting the background intensity from obtained value we determine the signal strength.

The results are represented in the Table I. From the comparison of the signal and detection limit we can eline the presence of the ^{44}Sc γ -line with confidence level C.L. exceeding 95%. To analyze possible systematic error we reveal the spectra for four points in the vicinity of the Cassiopeia A source and find it negligible.

7. Conclusion.

We briefly outlined here some basic properties and transmutations of chemical elements important for processes powering the *engines* which drive many sites of the Universe: life on the Earth, an evolution of stars, galaxies etc. These are the fusion reactions of light nuclides that give the predominant energy source in the stars. Iron gives then the final ash for nuclear reaction sequences at hydrostatic burning. The thermonuclear fusion reactors are the respective counterpart at the Earth based environment. Magnetically confined fusion plasma, or Tokamak reactors are viewed as promising direction and respective future experimental facility ITER aims to make a bridge from plasma physics to future electricity-producing fusion power plants.

Nova and supernova represent plausible astrophysical site candidates for synthesis of heavy atomic nuclei and renewing other nuclear components. Magnetization of hot dense astrophysical plasma in vicinity of the neutrino sphere is crucial for occurrence an explosion and can leave its trace in nucleosynthesis. Such spectacular astronomical phenomena yield, in particular, the actinides containing basic fuel for nuclear fission reactors, among others.

As we have seen the efforts towards a better understanding of astrophysical nuclear transmutation problems are important not only for

fundamental research, but capable to explore new ideas for nuclear fuel cycle technology. For instance, the problems of high-level toxic radioactive waste might be overcome by, e.g., construction and operation the Transmutation Facilities (e.g., Accelerator-Driven System - ADS) including the nuclear reaction networks similar to those occurred at nucleosynthesis in astrophysical plasmas. Therefore, the joint efforts in nuclear astrophysics and nuclear technology would be highly beneficial for both sides, and can provide an opportunity for a contribution to the solution of problems surrounding decommissioning and utilization of spent fuel and the nuclear powerplants themselves, especially, annealing the radioactive toxic nuclear waste.

References

1. A. Bohr, B.R. Mottelson // Nuclear Structure. 1969. Benjamin, NY
2. S.G. Moiseenko, G.S. Bisnovatyj-Kogan, N.V. Ardeljan // A magnetorotational core-collapse model with jets. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, - 2006, - V. 370, - P. 501
3. V.N. Kondratyev // Statistics of Magnetic Noise in Neutron Star Crusts. *Phys. Rev. Lett.* 2002, V. 88, 221101
4. V.N. Kondratyev // Neutron Capture Reactions in Strong Magnetic Fields of Magnetars. *Phys. Rev.*, - C 2004, V. 69, 038801
5. V.N. Kondratyev, I.M. Kadenko // Nucleosynthesis in strong magnetic fields at statistical equilibrium. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, - 2005, V.359, P.927
6. P. Möller, J.R. Nix, W.D. Myers, W.J. Swiatecki // Nuclear Ground State Masses and Deformations. *At. Data Nucl. Data Tables* 1995, V. 59, P. 185
7. V.N. Kondratyev, M.V. Zyzak, I.M. Kadenko // Synthesis and decay of nuclides in supernovae. *Physics of Atomic Nuclei*, - 2009, - V. 72, - №10, - P. 1835-1839
8. <http://virgo.bitp.kiev.ua>

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 512.64, 512.55

Г.В. Крюкова, аспірант.

Алгебри Лі, асоційовані з цілими квадратичними формами

У даній роботі розглядаються цілі квадратичні форми та алгебраїчні структури з ними пов'язані.

Аналогічно до [1] кожній цілій квадратичній формі ми ставимо у відповідність алгебру Лі за допомогою твірних та співвідношень в термінах додатно визначеної квазі-матриці Картана. Доводиться, що відповідні ізоморфізми алгебр визначаються класами еквівалентності цілих квадратичних форм відносно перетворення Габрієлова.

Ключові слова: цілі квадратичні форми, алгебра Лі, схеми Динкіна.

E-mail: galyna.kriukova@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

First we fix some notation and recall some of the standard definitions. Let $I_n = \{1, \dots, n\}$. For integral quadratic form $q: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$

$$q(x) = \sum_{i \in I_n} q_i x_i^2 + \sum_{i < j} q_{ij} x_i x_j, \quad q_i, q_{ij} \in \mathbb{Z}$$

denote by $(\cdot, \cdot) = (\cdot, \cdot)_q: \mathbb{Z}^n \times \mathbb{Z}^n \rightarrow \frac{1}{2}\mathbb{Z}$ the associated symmetrical bilinear form such that $(x, y)_q = \frac{1}{2}(q(x+y) - q(x) - q(y))$, $x, y \in \mathbb{Z}^n$.

According to [3] the integral quadratic form $q: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$ is called *semi integer* if $q_{ij} \in q_i \mathbb{Z}$ for all $i, j \in I_n$, and it is called *integer* if in addition $q_i \neq 0$ for all $i \in I_n$. The integer form q is called *unit* if $q_i = 1$ for all $i \in I_n$. The form q is called *classic* if $q_{ij} \leq 0$ for all $i, j \in I_n$, $i \neq j$.

Let q be an integer form.

For any $x \in \mathbb{Z}^n$ such that $q(x) \neq 0$ define the automorphism $s_x: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}^n$ by the formulae

$$s_x(y) = y - 2 \frac{(x, y)}{(x, x)} x, \quad y \in \mathbb{Z}^n.$$

G.V. Kriukova, PhD student.

The Lie algebra associated to an integer quadratic form

We consider integer quadratic forms. The use of quadratic forms as a tool for characterizing classes of finite dimensional algebras and Lie algebras is well known and widely accepted.

To any integer form we associate a Lie algebra in generators and relations in terms of the positive quasi-Cartan matrix. It is shown that corresponding isomorphism type of algebras is determined by the Gabrielov-equivalence class of integer quadratic form.

Key Words: integer quadratic forms, Lie algebra, Dynkin diagram.

Then $s_x^2 = \text{id}_{\mathbb{Z}^n}$, and for $x, y, z \in \mathbb{Z}^n$, $(x, x) \neq 0$ there hold

$$\begin{aligned} s_{-x}(y) &= s_x(y), \quad s_x(-y) = -s_x(y), \\ s_x(x) &= -x, \quad (s_x(y), s_x(z)) = (y, z), \\ s_{s_\alpha(\beta)} &= s_\alpha s_\beta s_\alpha^{-1}. \end{aligned}$$

The automorphism s_x is called a *reflection* relative to x .

Let $R = \{\alpha_i\}_{i \in I_n}$ denotes the canonical base of $\mathbb{Z}$ -lattice $\mathbb{Z}^n$. Let $I_n^* = \{i \in I_n \mid (\alpha_i, \alpha_i) \neq 0\}$. Denote by Δ_q the subset of $\mathbb{Z}^n$ defined by

- 1) $\alpha_i \in \Delta_q$ for all $i \in I_n^*$;
- 2) if $x \in \Delta_q$, $i \in I_n^*$, then $s_{\alpha_i}(x) \in \Delta_q$.

Then Δ_q is called the set of *roots* of q . If the form q is integer then any root $\alpha \in \Delta_q$ belongs to integral lattice $\mathbb{Z}(R)$ with the base R . Thus a vector $x \in \mathbb{Z}^n$ is called a *root* if there is sequence of reflections such that

$$x = s_{\alpha_{i_1}} s_{\alpha_{i_2}} \dots s_{\alpha_{i_k}}(\alpha_l), \quad i_1, \dots, i_k, l \in I_n.$$

A square matrix with integer coefficients A is called a *quasi-Cartan matrix* if it is symmetrizable (there exists a diagonal matrix D with positive diagonal entries such that DA is symmetric) and

$A_{ii} = 2$ for all i . A quasi-Cartan matrix is called *Cartan matrix* if it is positive definite and $A_{ij} \leq 0$ for all $i \neq j$.

We consider an integer matrix $A_q = (A_{ij})_{i,j \in I_n}$ with $A_{ij} = \frac{2(\alpha_i, \alpha_j)}{(\alpha_i, \alpha_i)}$ if $q_i \neq 0$ and $A_{ij} = 0$ otherwise. Obviously $A_{ii} = 2$ and $A_{ij} = \frac{q_j}{q_i}$ for $i \neq j$, and A_q is symmetrizable by matrix $D = \text{diag}(q_1, \dots, q_n)$. Thus A_q is quasi-Cartan matrix, and A_q is Cartan matrix iff form q is positive definite and classic.

Each Cartan matrix determines a unique semisimple complex Lie algebra via the Chevalley-Serre, sometimes called simply the Serre relations. Following [1] we develop the classical Serre relations in the following form. Given an integer form $q: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$ let $\mathfrak{g}(q)$ be the Lie algebra defined by the generators $\{e_i, e_{-i}, h_i\}_{i \in I_n}$ and the relations:

$$(w.1) \quad [h_i, h_j] = 0;$$

$$(w.2) \quad [e_i, e_{-i}] = h_i, [e_i, e_{-j}] = 0 \text{ for } i \neq j;$$

$$(w.3) \quad [h_i, e_j] = A_{ij}e_j, [h_i, e_{-j}] = -A_{ij}e_{-j};$$

$$(\theta_{ij}^+) \quad \text{ad}(e_i)^{|A_{ij}|+1}(e_j) = 0, i \neq j$$

$$(\theta_{ij}^-) \quad \text{ad}(e_{-i})^{|A_{ij}|+1}(e_{-j}) = 0, i \neq j$$

Theorem 1.1 ([4]). *If q is positive definite and classic integer form then $\mathfrak{g}(q)$ is a semisimple (and finite dimensional) Lie algebra.*

In section 2 similarly to [1] we generalize Serre's Theorem to give an explicit representation in generators and relations for any semisimple Lie algebra in terms of a positive quasi-Cartan matrix.

2 Lie algebras associated with positive integer forms

The vectors $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ of canonical base R themselves are called the *simple roots* of q , and R is called the simple root base of q . Given a simple root base R of $\mathbb{Z}^n$, the quadratic form $q: \mathbb{Z}(R) \rightarrow \mathbb{Z}$, and $r, s \in I_n$, we construct the new root base $R' = \{\alpha'_k, k \in I_n\}$ of $\mathbb{Z}^n$ by the following way:

$$\alpha'_k = \alpha_k, k \neq r,$$

$$\alpha'_r = s_{\alpha_s}(\alpha_r) = \alpha_r - A_{sr}\alpha_s.$$

Then the form q' is uniquely defined. Correspondent form transformation R_{sr}^+ is a *Gabrielov transformation* or *reduction*.

Sign-inversion is a linear transformation S_i defined as following:

$$S_i(\alpha_j) = \alpha_j, j \neq i,$$

$$S_i(\alpha_i) = -\alpha_i.$$

Two forms q and q' are called *G-equivalent* if one comes from another after a sequence of Gabrielov transformations, sign-inversions or a permutation of the variables.

Two forms q and q' are called *$\mathbb{Z}$ -equivalent* if one comes from another after a $\mathbb{Z}$ -invertible linear transformation. For two $\mathbb{Z}$ -equivalent forms q and q' , q is non-negative (positive) iff q' is non-negative (positive).

Obviously G -equivalent forms are $\mathbb{Z}$ -equivalent too. While in general an automorphism of $\mathbb{Z}$ does not preserve integer forms, the class of integer forms is stable under Gabrielov transformations. Moreover:

Theorem 2.1. *Two connected, positive integer forms q and q' are $\mathbb{Z}$ -equivalent and define identical sets of roots if and only if they are G -equivalent.*

Proof. ($\Leftarrow$) Easy to see, that G -equivalent transformation of form preserves its set of roots. So if two forms are G -equivalent then they are $\mathbb{Z}$ -equivalent and define identical sets of roots

($\Rightarrow$) Following result has been shown in [7]:

Proposition 1. *Let q be connected positive quadratic form. Then there exists a finite sequence R of reductions of a type R_{ij}^+ such that $R(q)$ is a connected classical positive form of Dynkin type.*

Thus for positive definite forms q and q' there exist an uniquely determined Dynkin type Δ and Δ' such that $q \sim_G q_\Delta$ and $q' \sim_G q_{\Delta'}$. q and q' are $\mathbb{Z}$ -equivalent and define identical sets of roots if and only if $\Delta = \Delta'$. In order to prove theorem it is enough to show, that $q_\Delta \sim_G q_{\Delta'}$. It follows directly from fact that Weyl group acts transitively on set of positive (simple) root systems [6].

Note that the connectivity assumption is important for the validity of this result. $\square$

Proposition 2. *Let $q: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}$ be positive integer form and $\mathfrak{g}(q)$ be corresponding Lie algebra with generators $\{e_i, e_{-i}, h_i\}_{i \in I_n}$. We consider $q' = R_{st}^+(q)$ — Gabrielov transformation of form q . Let $\mathfrak{g}(q')$ be corresponding to q' Lie algebra with generators $\{e'_i, e'_{-i}, h'_i\}_{i \in I_n}$. Then homomorphism $\varphi: \mathfrak{g}(q') \rightarrow \mathfrak{g}(q)$ mapping the generators e'_i, e'_{-i}, h'_i to elements $\bar{e}_i = e_i, \bar{e}_{-i} =$*

$e_{-i}, i \neq r, \tilde{e}_r = \frac{1}{|A_{sr}|}(\text{ad } e_s)^{|A_{sr}|}(e_r), \tilde{e}_{-r} = \frac{(-1)^{|A_{sr}|}}{|A_{sr}|}(\text{ad } e_{-s})^{|A_{sr}|}(e_{-r})$ and $\tilde{h}_i = h_i, i \neq r, \tilde{h}_r = h_r - A_{sr}h_s$ respectively is an isomorphism of Lie algebras.

Proof. We have to show that there is inverse homomorphism $\psi: \mathfrak{g}(\mathfrak{q}) \rightarrow \mathfrak{g}(\mathfrak{q}')$ such that $\varphi \circ \psi = \psi \circ \varphi = 1$ and that following relations hold:

$$(w.1) \quad [\tilde{h}_i, \tilde{h}_j] = 0;$$

$$(w.2) \quad [\tilde{e}_i, \tilde{e}_{-i}] = \tilde{h}_i, [\tilde{e}_i, \tilde{e}_{-j}] = 0 \text{ for } i \neq j;$$

$$(w.3) \quad [\tilde{h}_i, \tilde{e}_j] = A_{ij}\tilde{e}_j, [\tilde{h}_i, \tilde{e}_{-j}] = -A_{ij}\tilde{e}_{-j};$$

$$(\theta_{ij}^+) \quad \text{ad}(\tilde{e}_i)^{|A_{ij}|+1}(\tilde{e}_j) = 0, i \neq j$$

$$(\theta_{ij}^-) \quad \text{ad}(\tilde{e}_{-i})^{|A_{ij}|+1}(\tilde{e}_{-j}) = 0, i \neq j$$

Clearly, if $i, j \neq r$ these elements satisfy the relations with respect to $\mathfrak{q}$. Thus only cases involving the index r remain to be considered. $i, j \neq r$.

It can be shown using induction and Jacobi identity for statements with $\tilde{e}_r, \tilde{e}_{-r}$ and simple calculation for others. For instance using (w.1) we have for all $i \neq r$:

$$[\tilde{h}_i, \tilde{h}_r] = [h_i, h_r - A_{sr}h_s] = [h_i, h_r] - A_{sr}[h_i, h_s] = 0.$$

$$[\tilde{h}_r, \tilde{h}_r] = [h_r + \sigma\alpha h_s, h_r + \sigma\alpha h_s] = 0.$$

It follows that relation (w.1) holds:

$$[\tilde{h}_i, \tilde{h}_j] = 0, \forall i, j \in I_n.$$

Let us consider: $[\tilde{e}_r, \tilde{e}_{-r}]$. Suppose, $A_{sr} = -1$. Then using Jacobi identity we have:

$$\begin{aligned} [\tilde{e}_r, \tilde{e}_{-r}] &= [[e_r, e_s], -[e_{-r}, e_{-s}]] = \\ &= -[[[e_r, e_s], e_{-r}], e_{-s}] - [e_{-r}, [[e_r, e_s], e_{-s}]]. \end{aligned}$$

In any Lie algebra for any elements x, y, z , if $[x, y] = 0$ then $[x, y, z] = [y, x, z]$, $[x, z, y] = [y, z, x]$, and $[[x, z], y] = [[y, z], x]$, $[[z, x], y] = [[z, y], x]$. Then using $[e_r, e_{-s}] = [e_s, e_{-r}] = 0$ we get:

$$\begin{aligned} [\tilde{e}_r, \tilde{e}_{-r}] &= \\ &= -[[[e_r, e_{-r}], e_s], e_{-s}] - [e_{-r}, [[e_{-s}, e_s], e_r]] = \\ &= -[[h_r, e_s], e_{-s}] - [e_{-r}, [-h_s, e_r]] = \\ &= -[A_{rs}e_s, e_{-s}] + [e_{-r}, A_{sr}e_r] = \\ &= -A_{rs}h_s - A_{sr}h_r = h_r - A_{sr}h_s = \tilde{h}_r. \end{aligned}$$

Using induction and considering case of positive A_{sr} we verify that (w.2) holds.

In an analogical sense using (w.3) we have for all $i \neq r$:

$$[\tilde{h}_i, \tilde{e}_{\varepsilon r}] = [h_i, \tilde{e}_{\varepsilon r}] = \frac{\varepsilon^\alpha}{\alpha!} [h_i, (\text{ad } e_{\varepsilon s})^\alpha(e_{\varepsilon r})].$$

By induction using (w.3) for any $\varepsilon_j = \pm 1$ and $1 \leq i_j \leq n$ holds

$$\begin{aligned} [h_k, e_{\varepsilon_1 i_1}, \dots, e_{\varepsilon_l i_l}] &= \\ &= \sum_{j=1}^l \varepsilon_j A_{ki_j} [e_{\varepsilon_1 i_1}, \dots, e_{\varepsilon_l i_l}] \end{aligned}$$

Applying this formula we have:

$$\begin{aligned} [h_i, (\text{ad } e_{\varepsilon s})^\alpha(e_{\varepsilon r})] &= \alpha \varepsilon \sigma A_{is} + \\ &+ \varepsilon A_{ir} (\text{ad } e_{\varepsilon s})^\alpha(e_{\varepsilon r}) = \varepsilon A'_{ir} (\text{ad } e_{\varepsilon s})^\alpha(e_{\varepsilon r}). \end{aligned}$$

Here we use $\alpha = |A_{sr}|$, $\sigma = -\text{sign}(A_{sr})$, and $\varepsilon \in \{-1, 1\}$.

Finally (w.3.1): $[\tilde{h}_i, \tilde{e}_{\varepsilon r}] = \varepsilon A'_{ir} \tilde{e}_{\varepsilon r}, i \neq r$.

One more case for all $j \neq r$ (w.3.2):

$$\begin{aligned} [\tilde{h}_r, \tilde{e}_{\varepsilon j}] &= [h_r - A_{sr}h_s, e_{\varepsilon j}] = \\ &= [h_r, e_{\varepsilon j}] - A_{sr}[h_s, e_{\varepsilon j}] = \varepsilon A_{rj}e_{\varepsilon j} - \\ &- \varepsilon A_{sr}A_{sj}e_{\varepsilon j} = \varepsilon A'_{rj}e'_{\varepsilon j}. \end{aligned}$$

Likewise we have (w.3.3): $[\tilde{h}_r, \tilde{e}_{\varepsilon r}] = \varepsilon A'_{rr} \tilde{e}_{\varepsilon r}$. It follows that relation (w.3) holds. Similarly other relations follow.

Hence we have a homomorphism of graded Lie algebras $\mathfrak{g}(\mathfrak{q}') \rightarrow \mathfrak{g}(\mathfrak{q})$ defined on generators. By similar construction we define a homomorphism $\mathfrak{g}(\mathfrak{q}) \rightarrow \mathfrak{g}(\mathfrak{q}')$ (reduction in the reverse direction): $\tau = -\text{sign}(A'_{sr}), \beta = |A'_{sr}|$. Observe that $\sigma\tau = -1$. We define in $\mathfrak{g}(\mathfrak{q}')$ the elements

$$\begin{aligned} \tilde{e}'_i &= e'_i, \tilde{e}'_{-i} = e'_{-i} \text{ for } i \neq r, \\ \tilde{e}'_r &= \frac{1}{\beta!} (\text{ad } e'_s)^\beta(e'_r), \tilde{e}'_{-r} = \frac{(-1)^\beta}{\beta!} (\text{ad } e'_{-s})^\beta(e'_{-r}) \end{aligned}$$

and $\tilde{h}'_i = h'_i$ for $i \neq r, \tilde{h}'_r = h'_r + \tau\beta h'_s$.

Similarly these elements satisfy the relations (w.1)-(w.3) and $\theta_{ij}^+, \theta_{ij}^-$.

Thus we have homomorphism $\psi: \mathfrak{g}(\mathfrak{q}) \rightarrow \mathfrak{g}(\mathfrak{q}')$ mapping the generators e_i, e_{-i}, h_i to elements $\tilde{e}'_i, \tilde{e}'_{-i}$ and $\tilde{h}'_i$ for any i respectively.

We finally have to show that two homomorphisms φ and ψ are inverse:

$$\varphi \circ \psi = \psi \circ \varphi = 1.$$

Similarly to [2] easy to verify that $\varphi \circ \psi(e_i) = e_i, \varphi \circ \psi(e_{-i}) = e_{-i}$ and $\varphi \circ \psi(h_i) = h_i$ for any i . Thus homomorphism $\varphi \circ \psi$ preserves generators, that is $\varphi \circ \psi$ is identity homomorphism (the same for $\psi \circ \varphi$). That is ψ is inverse to φ , finally φ is isomorphism. $\square$

Theorem 2.2. *If q and q' are G -equivalent, then $g(q)$ and $g(q')$ are isomorphic as graded Lie algebras.*

Proof. We use induction after we have checked our statement at each of 3 possible transformations.

For permutation of variables this statement is trivial (corresponding isomorphism just reorder generators $\{e_i, e_{-i}, h_i\}_{i \in I_n}$).

For reduction previous Proposition holds.

For sign-inversion we consider elements of $g(q)$:

$$\tilde{e}_i = e_i, \tilde{e}_{-i} = e_{-i}, \tilde{h}_i = h_i, i \neq r,$$

$$\tilde{e}_r = e_{-r}, \tilde{e}_{-r} = e_r, \tilde{h}_r = -h_r.$$

Homomorphism $\varphi : g(q') \rightarrow g(q)$ mapping the generators e'_i, e'_{-i}, h'_i to elements $\tilde{e}_i, \tilde{e}_{-i}$ and $\tilde{h}_i$ for any i respectively to be homomorphism these elements should satisfy the relations (w.1)-(w.3) and $(\theta_{ij}^+), (\theta_{ij}^-)$ with respect to q' . Only cases involving the index r should be considered, for another relations obviously hold.

Note that $A'_{ij} = A_{ij}, A'_{rj} = -A_{rj}, A'_{jr} = -A_{jr}$ and $A'_{rr} = A_{rr}$ for any $i, j \neq r$

$$(w.1) [\tilde{h}_i, \tilde{h}_j] = \pm[h_i, h_j] = 0;$$

$$(w.2) [\tilde{e}_r, \tilde{e}_{-r}] = [e_{-r}, e_r] = -h_r = \tilde{h}_r, \\ [\tilde{e}_i, \tilde{e}_{-j}] = \pm[e_i, e_{-j}] = 0 \text{ for } i \neq j;$$

$$(w.3) \text{ for any } i, j \neq r:$$

$$[\tilde{h}_r, \tilde{e}_j] = [-h_r, e_j] = -A_{rj}e_j = A'_{rj}\tilde{e}_j; \\ [\tilde{h}_r, \tilde{e}_{-j}] = [-h_r, e_{-j}] = A_{rj}e_{-j} = -A'_{rj}\tilde{e}_{-j}; \\ [\tilde{h}_i, \tilde{e}_r] = [h_i, e_{-r}] = -A_{ir}e_{-r} = A'_{ir}\tilde{e}_r; \\ [\tilde{h}_i, \tilde{e}_{-r}] = [h_i, e_r] = A_{ir}e_r = -A'_{ir}\tilde{e}_{-r}; \\ [\tilde{h}_r, \tilde{e}_r] = [-h_r, e_{-r}] = A_{rr}e_{-r} = -A'_{rr}\tilde{e}_r; \\ [\tilde{h}_r, \tilde{e}_{-r}] = [-h_r, e_r] = A_{rr}e_r = -A'_{rr}\tilde{e}_{-r};$$

$$(\theta_{ij}^+) \text{ ad}(\tilde{e}_i)^{|A_{ij}|+1}(\tilde{e}_j) = \\ = \pm \text{ad}(e_i)^{|A_{ij}|+1}(e_j) = 0, i \neq j$$

$$(\theta_{ij}^-) \text{ ad}(\tilde{e}_{-i})^{|A_{ij}|+1}(\tilde{e}_{-j}) = \\ = \pm \text{ad}(e_{-i})^{|A_{ij}|+1}(e_{-j}) = 0, i \neq j$$

Homomorphism $\psi : g(q) \rightarrow g(q')$ we construct in the same way (relations hold analogically). It is straightforward to check that these maps are inverse.

This finishes the proof. $\square$

Using Proposition 1 we have

Theorem 2.3. *Let q be a (connected) positive integer form and Δ its Dynkin type, then algebras $g(q) = g(q_\Delta)$ are exactly finite-dimensional (simple) semisimple Lie algebras.*

3 Conclusions

Well-known results for unit quadratic forms are naturally generalized for integer quadratic forms. Some results we presented in previous papers [7], [8]. In this work for positive integer form a construction of a Lie algebra in terms of the quasi-Cartan matrix is proposed.

References

1. Barot M., Rivera D. Generalized Serre relations for Lie algebras associated with positive unit forms // Journal of Pure and Applied Algebra. – vol. 211. – 2007. – pp. 360-373.
2. Barot M., Kussin D., Lenzing H. The Lie algebra associated to a unit form // Journal of Algebra. – vol. 296. – 2006. – pp. 1-17.
3. Ройтер А.В. Корни целых квадратичных форм // Квадратичные формы и поликолчаны. – 1977. – с. 3-15
4. Серр Ж.-П. Алгебры Ли и группы Ли // Изд. "Мир Москва. – 1969.
5. Ringel C.M. Tame Algebras and Integral Quadratic Forms // Lecture notes in mathematics. – Springer – 1984.
6. Р. Стейнберг. Лекции о группах Шевалле // Изд. "Мир Москва. – 1975.
7. Golovaschuk N.S., Kriukova G.V. On non-negative integer quadratic forms // Bulletin of University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics. – 2009. – vol. 3. – pp. 14-21.
8. Головащук Н.С., Крюкова Г.В. Критерій невід'ємновизначеності цілих квадратичних форм // Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки. – 2009. – Вип. 4. – с. 7-13.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 524.85

С.П. Майданюк, к.ф.-м.н., ст. наук. співроб.
Квантовий метод визначення
проникності у FRW моделі з радіацією

У роботі розглядається закрита квантова модель Фрідманна-Робертсона-Уолкера з позитивною космологічною константою, радіацією та газом Чаплігіна. Для аналізу ймовірності народження всесвіту на інфляційній стадії як функції енергії радіації уведено нове визначення гвинта, що "вільно" поширюється у сильних полях. Зкоректовано граничну умову тунелювання Віленкіна, обчислено протоджіння та відбиття у повністю квантовому станцінарному підході.

Ключові слова: фізика раннього всесвіту, інфляція, рівняння Уілера-Де Вітта, газ Чаплігіна.

E-mail: maidan@kinr.kiev.ua

1 Introduction

To date, among all variety of models of early Universe one can select two prevailing approaches: these are the Feynman formalism of path integrals in multidimensional spacetime, developed by the Cambridge group and other researchers, called the "Hartle-Hawking method" [1], and a method based on direct consideration of tunneling in 4-dimensional Euclidian spacetime called the "Vilenkin method" [2]. In the quantum approach we have the following picture of the Universe creation: a closed Universe with a small size is formed from "nothing" (vacuum), where by the word "nothing" one refers to a quantum state without classical space and time. A wave function is used for a probabilistic description of the creation of the Universe and such a process is connected with transition of a wave through an effective barrier.

In majority of models tunneling is studied in details in the semiclassical approximations (for example, see [3-6]). Here, a *tunneling boundary condition* [3] could seem to be natural, where the wave function should represent an outgoing wave at the large scale factor a . However, whether is such a wave free in asymptotic region? If to draw attention on increasing gradient of potential, used with opposite sign and having a sense of force, acting "through the barrier" on this wave, then

S.P. Maydanyuk, PhD, Senior Sc. Researcher
Quantum method of determination of
penetrability in FRW model with
radiation

In paper the closed Friedmann-Robertson-Walker model with quantization in presence of the positive cosmological constant, radiation and Chaplygin gas is studied. For analysis of tunneling probability for birth of an asymptotically deSitter, inflationary Universe as a function of the radiation energy a new definition of a "free" wave propagating inside strong fields is introduced. Vilenkin's tunneling boundary condition is corrected, penetrability and reflection are calculated in fully quantum stationary approach.

Key Words: physics of the early universe, inflation, Wheeler-De Witt equation, Chaplygin gas

one come to contradiction: *influence of the potential on this wave is increased strongly at increasing a* [7]. Now a new question has been appeared: what should the wave represent in the cosmological problem? So, we come to necessity *to define "free" wave inside strong fields*.

The problem of correct definition of the wave in cosmology is reinforced more, if to calculate incident and reflected waves before the barrier. Even with known exact solution for the wave function there is uncertainty in determination of these waves. But penetrability is based on them.

In order to estimate probability of formation of Universe accurately, we need in the fully quantum basis. Aims of this paper are: (1) to give definition of the wave in strong fields; (2) to construct the fully quantum stationary method of determination of the penetrability and reflection using the definition of the wave above; (3) to estimate how much the semiclassical approach is differed from the fully quantum one.

2 A model in the Friedmann-Robertson-Walker metric with radiation and generalized Chaplygin gas

Let us start from a case of a closed ($k = 1$) FRW model in the presence of a positive cosmological constant $\Lambda > 0$, radiation and component of the Chaplygin gas. The minisuperspace Lagrangian

an has the form [8]:

$$\mathcal{L}(a, \dot{a}) = \frac{3a}{8\pi G} \left(-\dot{a}^2 + k - \frac{8\pi G}{3} a^2 \rho(a) \right), \quad (1)$$

where a is scale factor, $\dot{a}$ is derivative of a with respect to time coordinate t , $\rho(a)$ is a generalized energy density. In order to connect the stage of Universe with dust matter and its another accelerating stage, in Ref. [9] a new scenario with the *Chaplygin gas* was applied to cosmology. A quantum FRW-model with the Chaplygin gas has been constructed on the basis of equation of state instead of $p(a) = \rho(a)/3$ (where $p(a)$ is pressure) by $p_{Ch} = -A/\rho_{Ch}^\alpha$, where A is positive constant and $0 < \alpha \leq 1$. Solution of equation of state gives

$$\rho_{Ch}(a) = \left(A + \frac{B}{a^{3(1+\alpha)}} \right)^{1/(1+\alpha)}, \quad (2)$$

where B is a new constant. This model through one phase α connects the stage of Universe where dust dominates and DeSitter stage. At limit $\alpha \rightarrow 0$ eq. (2) is transformed into ρ_{dust} plus ρ_Λ . From such limit we find $A = \rho_\Lambda$, $B = \rho_{dust}$ and write the following generalized density [7]:

$$\rho(a) = \left(\rho_\Lambda + \frac{\rho_{dust}}{a^{3(1+\alpha)}} \right)^{1/(1+\alpha)} + \frac{\rho_{rad}}{a^4(t)}, \quad (3)$$

where $\rho_{rad}(a)$ is component describing the radiation (equation of state for radiation is $p(a) = \rho_{rad}(a)/3$, p is pressure) and $\rho_\Lambda = \Lambda/(8\pi G)$.

The passage to the quantum description of the evolution of the Universe is obtained by the procedure of canonical quantization in the Dirac formalism for systems with constraints. We obtain the Wheeler-De Witt (WDW) equation, which after multiplication on factor and passage of component with radiation ρ_{rad} into right part transforms into the following form [7]:

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial a^2} + V(a) \right\} \varphi(a) = E_{rad} \varphi(a), \quad E_{rad} = \frac{3\rho_{rad}}{2\pi G}, \quad (4)$$

$$V(a) = \left(\frac{3}{4\pi G} \right)^2 k a^2 - \frac{3}{2\pi G} a^4 \times \left(\rho_\Lambda + \frac{\rho_{dust}}{a^{3(1+\alpha)}} \right)^{1/(1+\alpha)}, \quad (5)$$

where $\varphi(a)$ is wave function of Universe. For the Universe of closed type (at $k = 1$) at $8\pi G \equiv \Lambda M_p^{-2} = 1$ we have:

$$V(a) = 36a^2 - 12a^4 \left(\Lambda + \frac{\rho_{dust}}{a^{3(1+\alpha)}} \right)^{1/(1+\alpha)} \quad (6)$$

and $E_{rad} = 12\rho_{rad}$.

Let us expand the potential (6) close to arbitrary point $\bar{a}$ by powers $q = a - \bar{a}$ and restrict ourselves by linear item:

$$V_{Ch}(q) = V_0 + V_1 q. \quad (7)$$

For coefficients V_0 and V_1 I find:

$$\begin{aligned} V_0 &= V_{Ch}(a = \bar{a}), \\ V_1 &= 72\bar{a} + 12\bar{a}^3 \left\{ -4\Lambda - \frac{\rho_{dust}}{\bar{a}^{3(1+\alpha)}} \right\} \times \\ &\times \left(\Lambda + \frac{\rho_{dust}}{\bar{a}^{3(1+\alpha)}} \right)^{-\alpha/(1+\alpha)} \end{aligned} \quad (8)$$

and eq. (4) obtains form:

$$-\frac{d^2}{dq^2} \varphi(q) + (V_0 - E_{rad} + V_1 q) \varphi(q) = 0. \quad (9)$$

After change of variable

$$\xi = \frac{E_{rad} - V_0}{|V_1|^{2/3}} - \frac{V_1}{|V_1|^{2/3}} q \quad (10)$$

we have

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \varphi(\xi) + \xi \varphi(\xi) = 0. \quad (11)$$

3 Motivations to correct Vilenkin's boundary condition of tunneling

Let us analyze how much a choice of the boundary condition in the asymptotic region is motivated.

- In tasks of decay in nuclear and atomic physics the potentials of interactions tend to zero in the asymptotic region. Here, an application of the boundary condition at limit of infinity does not give questions. In cosmology we deal with another, principally different type of the potential, with increasing of the scale factor a modulus of this potential increases. A gradient of the potential, used with opposite sign and having a sense of force acting on the wave, increases also. So, there is nothing mutual with free propagation of the wave in the asymptotic region [7].

- Results of Ref. [8] reinforce a seriousness of such a problem: the scale factor a in the external region is larger, the period of oscillations of the wave function is smaller. This requires with increasing a to

decrease step of calculations of the wave function. This increases time of calculations, increases errors. So, boundary condition in the asymptotic region has no practical sense in cosmology. In contrary, in nuclear and atomic physics calculations of the asymptotic wave are the most stable.

- It has not been known whether Universe expands at extremely large scale factor a . Just the contrary, it would like to clarify this, imposing Universe to expand in initial stage.

So, I redefine the boundary condition as [7]

the boundary condition should fix the wave function so that it represents the wave, interaction between which and the potential barrier is minimal at such a value of the scale factor a where action of this potential is minimal.

To give a mathematical formulation for this definition, we are confronted with two questions:

- 1) What should the free wave represent at arbitrary point inside cosmological potential?
- 2) At which coordinate is imposition of this boundary condition the most corrected?

At first, let us solve the second question. Which should this point be: or this is a turning point (where the potential coincides with energy of radiation), or this is a coordinate where a gradient of the potential (having a sense of *force of interaction*) becomes zero, or this is a coordinate where the potential becomes zero?

We define this coordinate where the force acting on the wave is minimal. We define the force as the gradient of the potential used with opposite sign.

4 Definition of the wave minimally interacting with the potential

Definition 1 (strict definition of the wave). *The wave is such a linear combination of two partial solutions of the wave function that the change of the modulus ρ of this wave function is closest to constant under variation of a :*

$$\left. \frac{d^2}{da^2} \rho(a) \right|_{a=a_{tr}} \rightarrow 0. \quad (12)$$

For some types of potentials it is more convenient to define the wave less strongly.

Definition 2 (weak definition of wave). *The wave is such a linear combination of two partial solutions of wave function that the modulus ρ changes minimally under variation of a :*

$$\left. \frac{d}{da} \rho(a) \right|_{a=a_{tr}} \rightarrow 0. \quad (13)$$

Now we shall look for the function $\varphi(\xi)$ as

$$\varphi(\xi) = T \cdot \Psi^{(+)}(\xi). \quad (14)$$

$$\Psi^{(\pm)}(\xi) = \int_0^{u_{\max}} \exp \pm i \left(-\frac{u^3}{3} + f(\xi)u \right) du, \quad (15)$$

where T is an unknown factor, $f(\xi)$ is an unknown continuous function satisfying $f(\xi) \rightarrow \text{const}$ at $\xi \rightarrow 0$, and $u_{\max}$ is the unknown upper limit of integration. The real part of $f(\xi)$ gives a contribution to the phase of the integrand function while the imaginary part of $f(\xi)$ deforms modulus.

At small enough values of $|\xi|$ we represent $f(\xi)$ in the form of a power series:

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{+\infty} f_n \xi^n, \quad (16)$$

where f_n are constants. Substituting formula (15) for $\Psi(\xi)$ into equation (11), we find (see Ref. [7]):

$$\begin{aligned} f_2^{(\pm)} &= \pm \frac{f_1^2}{2i} \frac{J_2^{(\pm)}}{J_1^{(\pm)}}, \\ f_3^{(\pm)} &= \pm \frac{4f_1 f_2^{(\pm)} J_2^{(\pm)} - J_0^{(\pm)}}{6i J_1^{(\pm)}}, \\ f_{n+2}^{(\pm)} &= \frac{\sum_{m=0}^n (n-m+1)(m+1) f_{n-m+1}^{(\pm)} f_{m+1}^{(\pm)}}{i(n+1)(n+2)} \frac{J_n^{(\pm)}}{J_1^{(\pm)}}, \end{aligned} \quad (17)$$

where

$$\begin{aligned} J_0^{(\pm)} &= \int_0^{u_{\max}} \exp \pm i \left(-\frac{u^3}{3} + f_0 u \right) du, \\ J_1^{(\pm)} &= \int_0^{u_{\max}} u \exp \pm i \left(-\frac{u^3}{3} + f_0 u \right) du, \\ J_2^{(\pm)} &= \int_0^{u_{\max}} u^2 \exp \pm i \left(-\frac{u^3}{3} + f_0 u \right) du. \end{aligned} \quad (18)$$

In order to be the solution $\Psi(\xi)$ closer to the well-known Airy functions, $\text{Ai}(\xi)$ and $\text{Bi}(\xi)$, we choose $f_0 = 0$, $f_1 = 1$.

5 Calculations of the wave function

In order to provide a linear independence between two partial solutions for the wave function effectively, I look for the first partial solution increasing in the region of tunneling and the second one decreasing in this tunneling region. At first, I define each partial solution and its derivative at a selected starting point, and then I calculate them in the region close enough to this point using the *method of beginning of the solution*. Here, for the partial solution which increases in the barrier region, as the starting point I use arbitrary point a inside well with its possible shift at non-zero energy E_{out} or equals to zero $a = 0$ at null energy E_{out} , and for the second partial solution which decreases in the barrier region, I select the starting point to be equal to external turning point $a_{\text{tp, out}}$. Then both partial solutions and their derivatives I calculate independently in the whole required range of a using the *method of continuation of the solution*, which is improvement of the Numerov method with a constant step. By such a way, I obtain two partial solutions for the wave function and their derivatives in the whole studied region.

Having obtained two linearly independent partial solutions $\varphi_1(a)$ and $\varphi_2(a)$, we make up a general solution (prime is for derivative with respect to a):

$$\varphi(a) = T \cdot (C_1 \varphi_1(a) + C_2 \varphi_2(a)), \quad (19)$$

$$C_1 \begin{vmatrix} \Psi \varphi_2' & \Psi' \varphi_2 \\ \varphi_1 \varphi_2' & \varphi_1' \varphi_2 \end{vmatrix}_a = C_2 \begin{vmatrix} \Psi' \varphi_1 & \Psi \varphi_1' \\ \varphi_1 \varphi_2' & \varphi_1' \varphi_2 \end{vmatrix}_a, \quad (20)$$

where T is normalization factor, C_1 and C_2 are constants found from the boundary condition.

6 Problem of interference between the incident and reflected waves

Rewriting the wave function φ_{total} in the internal region through a summation of incident φ_{inc} wave and reflected φ_{ref} wave:

$$\varphi_{\text{total}} = \varphi_{\text{inc}} + \varphi_{\text{ref}}, \quad (21)$$

we consider the total flux:

$$J(\varphi_{\text{total}}) = J_{\text{inc}} + J_{\text{ref}} + J_{\text{mixed}}, \quad (22)$$

where

$$\begin{aligned} j_{\text{inc}} &= i \left(\varphi_{\text{inc}} \nabla \varphi_{\text{inc}}^* - \text{h. c.} \right), \\ j_{\text{ref}} &= i \left(\varphi_{\text{ref}} \nabla \varphi_{\text{ref}}^* - \text{h. c.} \right), \\ j_{\text{mixed}} &= i \left(\varphi_{\text{inc}} \nabla \varphi_{\text{ref}}^* + \varphi_{\text{ref}} \nabla \varphi_{\text{inc}}^* - \text{h. c.} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

The j_{mixed} component describes interference between the incident and reflected waves in the internal region (let us call it as *mixed component of the total flux* or simply *flux of mixing*). From constancy of the total flux j_{total} we find flux j_{tr} for the wave transmitted through the barrier, and:

$$j_{\text{inc}} = j_{\text{tr}} - j_{\text{ref}} - j_{\text{mixed}}, \quad j_{\text{tr}} = j_{\text{total}} = \text{const.} \quad (24)$$

Now one can see that *the mixed flux introduces ambiguity in determination of the penetrability and reflection for the same known wave function*.

In the radial problem of quantum decay definition of penetrability and reflection looks to be conditional as the incident and reflected waves should be defined inside internal region from the left of the barrier. In order to formulate these coefficients, we shall include into definitions coordinates where the fluxes are defined (denote them as x_{left} and x_{right}):

$$T = \frac{j_{\text{tr}}(x_{\text{right}})}{j_{\text{inc}}(x_{\text{left}})}, \quad R = \frac{j_{\text{ref}}(x_{\text{left}})}{j_{\text{inc}}(x_{\text{left}})}, \quad M = \frac{j_{\text{mixed}}(x_{\text{left}})}{j_{\text{inc}}(x_{\text{left}})}. \quad (25)$$

From eqs. (24) and (25) we obtain [7] (j_{tr} and j_{ref} are directed in opposite directions, j_{inc} and j_{tr} in the same directions):

$$|T| + |R| - M = 1. \quad (26)$$

Now we see that condition $|T| + |R| = 1$ has sense in quantum mechanics only if there are no any interference between incident and reflected waves which we calculate, and it is to use $j_{\text{mixed}} = 0$.

7 The penetrability and reflection: the fully quantum approach versus semi-classical one

Now we shall estimate by the method described above the coefficients of penetrability and reflection for the potential barrier (6) with parameters $A = 36$, $B = 12 \Lambda$, $\Lambda = 0.01$ at different values of the energy of radiation E_{rad} . We shall compare the found coefficient of penetrability with its value

Energy	Penetrability $P_{\text{penetrability}}$			Time τ	
	Full QM meth. 1	Full QM meth. 2	Method WKB	Full QM method 1	Method WKB
20.0	7.6221×10^{-30}	7.7349×10^{-29}	1.4692×10^{-29}	$9.4313 \times 10^{+29}$	$4.8928 \times 10^{+29}$
40.0	3.5680×10^{-26}	6.5169×10^{-25}	1.2298×10^{-25}	$2.1257 \times 10^{+26}$	$6.1670 \times 10^{+25}$
60.0	2.0591×10^{-22}	1.3423×10^{-21}	8.1523×10^{-22}	$3.8719 \times 10^{+23}$	$9.7797 \times 10^{+21}$
80.0	1.5530×10^{-18}	2.3850×10^{-17}	4.4346×10^{-18}	$5.3862 \times 10^{+18}$	$1.8862 \times 10^{+18}$
100.0	3.2922×10^{-14}	1.1053×10^{-13}	2.0304×10^{-14}	$2.6622 \times 10^{+14}$	$4.3167 \times 10^{+14}$
120.0	8.6052×10^{-11}	4.4005×10^{-10}	7.9523×10^{-11}	$1.0678 \times 10^{+11}$	$1.1555 \times 10^{+11}$
140.0	2.2012×10^{-8}	1.5460×10^{-6}	2.7128×10^{-7}	$4.3888 \times 10^{+8}$	$3.5612 \times 10^{+7}$
160.0	2.9685×10^{-5}	4.9980×10^{-3}	8.1663×10^{-4}	$3.4471 \times 10^{+5}$	$1.2530 \times 10^{+4}$
170.0	3.4894×10^{-3}	2.6078×10^{-1}	4.2919×10^{-2}	$3.0460 \times 10^{+3}$	$2.4820 \times 10^{+2}$

Табл. 1: The penetrability $P_{\text{penetrability}}$ of the barrier and duration τ of the formation of the Universe defined by eq. (29) in the FRW-model with the Chaplygin gas obtained in the fully quantum and semiclassical approaches (minimum of the hole is -93.579 and its coordinate is 1.6262, maximum of the barrier is 177.99 and its coordinate is 5.6866); the fully QM method 1 is calculations by the fully quantum approach for the boundary located in the coordinate of the minimum of the internal hole (i. e. coordinate is 1.6262), the fully QM method 2 is calculations by the fully quantum approach for the boundary located in the internal turning point $a_{\text{tp, int}}$ (coordinates of the turning points are in Tabl. 2)

which the semiclassical method gives. In the semiclassical approach we shall consider two following definitions of this coefficient:

$$P_{\text{penetrability}}^{\text{WKB}(1)} = \frac{1}{\theta^2},$$

$$P_{\text{penetrability}}^{\text{WKB}(2)} = \frac{4}{\left(2\theta + 1/(2\theta)^2\right)^2},$$

(27)

Results are presented in Tabl. 1. $P_{\text{penetrability}}^{\text{WKB}(2)}$ is not included in the table because it coincidence with $P_{\text{penetrability}}^{\text{WKB}(1)}$ to the first 8 digits. One can see that the fully quantum approach gives the penetrability close to its semiclassical value, which differs from results [10].

In the next Tabl. 2 the coefficients of the penetrability, reflection and mixing calculated

where

$$\theta = \exp \int_{a_{\text{tp}}^{(\text{int})}}^{a_{\text{tp}}^{(\text{ext})}} |V(a) - E| da.$$

(28)

One can estimate also *duration of a formation of the Universe*, using by definition (15) in Ref. [10]:

$$\tau = 2 a_{\text{tp, int}} \frac{1}{P_{\text{penetrability}}}.$$

(29)

in the fully quantum method are presented for the energy of radiation E_{rad} close to the height of the barrier. One can see that summation of all such values for coefficients allows to reconstruct the property (26) with accuracy of the first 11–18 digits. Now it becomes clear that the approach proposed in Ref. [10] and the semiclassical methods do not give such an accuracy.

8 Conclusions

In the paper the closed Friedmann–Robertson–Walker model with quantization in the presence of a positive cosmological constant, radiation and Chaplygin gas is studied. Note the following.

- 1) A fully quantum definition of the wave propagating inside strong field and interacting with them minimally has been

formulated. The tunneling boundary condition has been corrected.

- 2) A quantum stationary method of determination of penetrability and reflection relatively the barrier has been developed. Here, non-zero interference between the incident and reflected waves has been taken into account and for its estimation the coefficient of mixing has been introduced.

Energy	Fully quantum method				Turning points	
	Penetrability	Reflection	Interference	Summation	$a_{tp, in}$	$a_{tp, out}$
20.0	$7.6221543404 \times 10^{-30}$	1.0000000000000000	8.55×10^{-20}	1.0000000000000000	3.59	7.05
40.0	$3.5680158760 \times 10^{-26}$	1.0000000000000000	2.34×10^{-19}	1.0000000000000000	3.79	6.97
60.0	$2.0591415452 \times 10^{-22}$	1.0000000000000000	4.86×10^{-20}	1.0000000000000000	3.98	6.88
80.0	$1.5536040238 \times 10^{-18}$	1.0000000000000000	2.08×10^{-19}	1.0000000000000000	4.18	6.78
100.0	$3.2922846164 \times 10^{-14}$	0.9999999999999996	3.13×10^{-20}	1.0000000000000000	4.38	6.67
120.0	$8.6052092530 \times 10^{-11}$	0.99999999991394	1.06×10^{-19}	1.0000000000000000	4.59	6.55
140.0	$2.2012645564 \times 10^{-8}$	0.99999997798735	1.60×10^{-19}	1.0000000000000000	4.83	6.39
160.0	$2.9685643504 \times 10^{-5}$	0.99997031435611	6.94×10^{-20}	0.99999999999961	5.11	6.18
170.0	$3.4894544195 \times 10^{-3}$	0.99651054553176	2.02×10^{-19}	0.99999999995131	5.31	6.02

Table 2: The coefficients of the penetrability, reflection and mixing calculated by the fully quantum method and test on their summation for the FRW-model with the Chaplygin gas density component (the fully quantum approach 1 is used at the internal boundary located in the coordinate of the minimum of the internal hole)

In such an approach the penetrability of the barrier for the studied FRW-model has been estimated. Note the following.

- The probability for birth of asymptotically deSitter Universe is close to results obtained by the semiclassical approach, but differs on results obtained by non-stationary approach [10] (see Tabl. 1 and 2).
- The reflection from the barrier has been determined at first time. It is differed essentially on 1 at the energy of radiation close enough to the barrier height (see Tabl. 2).
- The modulus of the coefficient of mixing (indicating interference between the incident and reflected waves) is less 10^{-19} .
- A property (26) is reconstructed to the first 11-18 digits (see Tabl. 2).

References

1. Hartle J. B., Hawking S. W. Wave function of the Universe // *Phys. Rev.* – D28 (1983). – p.2960-2975.
2. Vilenkin A. Creation of Universes from nothing // *Phys. Lett.* – B117 (1982). – p.25-28.
3. Vilenkin A. Approaches to quantum cosmology // *Phys. Rev.* – D50 (1994). – p.2581-2594, gr-qc/9403010.
4. Rubakov V. A. Quantum cosmology // *Proceedings: Structure formation in the Universe* (Edited by R. G. Crittenden and N. G. Turok, Kluwer, 1999), p. 63-74, gr-qc/9910025.
5. Casadio R., Finelli F., Luzzi M., Venturi G. Improved WKB analysis of cosmological perturbations // *Phys. Rev.* – D71 (2005). – p.043517 [12 pages], gr-qc/0410092.
6. Luzzi M. Semiclassical Approximations to Cosmological Perturbations // Ph. D. thesis (Advisor: Prof. Giovanni Venturi, University of Bologna, 2007), p.148, arXiv:0705.3764.
7. Maydanyuk S. P. A fully quantum method of determination of penetrability and reflection coefficients in quantum FRW model with radiation // *Int. Journ. Mod. Phys.* – D19 (2010). – p.395-435, arXiv:0812.5081.
8. Maydanyuk S. P., Wave function of the Universe in the early stage of its evolution // *Europ. Phys. Journ.* – C57 (2008). – p.769-784, arxiv.org:0707.0585.
9. Kamenshchik A. Y., Moschella U., Pasquier V. *Phys. Lett.* – B511 (2001). – p.265, gr-qc/0103004.
10. Monerat G. A., Oliveira-Neto G., Correa Silva E. V. et al. Dynamic of the early universe and the initial condition for inflation in a model with radiation and a Chaplygin gas // *Phys. Rev.* – D76 (2007). – 024017 [11 pages].

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 519.55

І. Мельник, к. ф.-м. н.

Ультрадобутки d – MP –модулів

У статті продовжуються дослідження властивостей d – MP –модулів, первинних диференціальних підмодулів та квазіпервинних підмодулів диференціальних модулів. Досліджується питання ультразамкнутості класів d – MP –модулів. Встановлено, що якщо кожний диференціально первинний підмодуль є первинним диференціальним, то сам модуль є d – MP –модулем.

Ключові слова: d – MP –модуль, квазіпервинний диференціальний підмодуль, диференціально первинний підмодуль, ультрадобуток.

E-mail: ivannamelnyk@yahoo.com

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

The concept of d - MP -module evolved quite naturally from the concept of d - MP -ring, introduced by H. Gorman [1], [2] as differential rings for which the radical of every differential ideal is differential. Maximal among differential ideals of d - MP -rings are prime. d - MP -ring properties were further studied by A. Nowicki [3]. W. Keigher [4] introduced so called special differential rings and proved they are equivalent to d - MP -rings.

Many recent studies have focused on prime submodules and their analogues. However, few investigations have been focused on the differential analogues of prime submodules. Ultraproducts of prime ideals in non-differential case were considered by B. Olberding [11].

In this paper the results were extended to the case of differential submodules. It also studies the properties of d - MP -modules, formulated using the operator $()_{\#}$.

Unless otherwise specified, all rings are assumed to be associative with nonzero identity, and all modules are unitary left modules. By ideal we always mean a two-sided ideal. We consider ordinary differential rings. The term *differential ring* will refer to a ring R endowed with the derivation $\delta: R \rightarrow R$. In what follows, (M, d) denotes a left *differential R -module*.

For any subset X of M , $\text{rad}(X)$ will denote the radical of X , i. e. the intersection of all prime

I. Melnyk, PhD

Ultraproducts of d – MP –modules

In the paper we investigate the further properties of d – MP –modules, prime differential submodules and quasi-prime submodules of differential modules. A question on ultraclosedness of classes of d – MP –modules is also studies. It is established that a differential module is d – MP –module if its every differentially prime submodule is prime differential.

Key Words: d – MP –module, quasi-prime differential submodule, differentially prime submodule.

submodules in M containing X .

For $r \in R$, $m \in M$ introduce the following notations:

$$r^{(n)} = \delta^{(n)}(r), \quad m^{(n)} = d^{(n)}(m),$$

$$r^{(\infty)} = \{r^{(n)} | n \in \mathbb{N} \cup \{0\}\},$$

$$m^{(\infty)} = \{m^{(n)} | n \in \mathbb{N} \cup \{0\}\}.$$

Let $[r]$ be the least differential ideal containing $r \in R$, and let $[m]$ be the least differential submodule containing $m \in M$. $[r] = (r^{(\infty)})$, $[m] = (m^{(\infty)})$.

If X is an arbitrary subset of the differential R -module M , denote

$$X_{\#} = \{x \in M | x^{(n)} \in X, \quad \forall n \in \mathbb{N} \cup \{0\}\}.$$

The operator $()_{\#}$ on subsets of a module has the following properties: $X_{\#}$ is differentially closed for any subset X of M ; the union and the intersection of any family of differentially closed subsets is differentially closed; finite products and sums of differentially closed subsets are differentially closed; the image and preimage of differentially closed subsets under differential homomorphisms are differentially closed; for any subset X of D -module M , $X_{\#}$ is the largest differentially closed subset of M contained in X .

A differential R -module M is called *differentially prime* [10] if $\text{Ann}_l(N) = \text{Ann}_l(M)$ for every

nonzero differential submodule N of M . A differential submodule N of M is called *differentially prime* [10] if M/N is differentially prime.

Remind that [7] a non-empty subset S of the differential ring R is called a *dm-system* if for any $s, t \in S$ there exist $r \in R$ and $n \in \mathbb{N}$ such that $srt^{(n)} \in S$.

Let S be a *dm-system* of R . A non-empty subset S^* of the differential R -module M is called an *Sdm-system* of the module M [10] if for any $s \in S$ and $x \in S^*$ there exist $r \in R$ and $n \in \mathbb{N}$ such that $srx^{(n)} \in S^*$. For a regular differential module the above concept transforms into *dm-system* [7]. The notion of *Sm-system* of module over non-commutative ring [8] follows quite easily in case when all the derivations are trivial.

A differential submodule N of a differential module M is differentially prime if and only if $M \setminus N$ is an *Sdm-system* of M for some *dm-system* S of the ring R .

For a differentially prime submodule N of M the following conditions are equivalent [10]:

- 1) $IK \subseteq N$ follows $K \subseteq N$ or $I \subseteq (N : M)$ for every differential ideal I and every differential submodule K of M ;
- 2) $[r][m] \subseteq N$ follows $m \in N$ or $r \in (N : M)$ for any $r \in R$ and $m \in M$.

A differential submodule Q of the differential R -module M is called *quasi-prime* if there exists an *Sm-system* S^* of M such that Q is maximal among differential submodules of M not meeting S^* . Prime differential submodules, as well as maximal differential submodules, are quasi-prime. Nontrivial examples of quasi-prime submodules are obtained as $P_\#$, where P is a prime differential submodule of M . Differentially prime and quasi-prime submodules coincide in differentially noetherian modules.

Any unexplained notation and terminology is standard (see [5], [6]).

2 d -MP-modules

A differential R -module M is called *d-MP-module* if for any prime differential submodule N of M the submodule $N_\#$ is a prime differential submodules of M .

It is proved in [10] that for a *d-MP-module* M the following conditions are equivalent:

- 1) any quasi-prime submodule N of M is prime;
- 2) any quasi-prime submodule N of M is radical, i. e. $\text{rad}(N) = N$;
- 3) any prime submodule, minimal over some differential submodule, is differential;
- 4) radical of each differential submodule is differential.

It is therefore easy to see that in *d-MP-modules* maximal among differential submodules are prime, which explains the term *d-MP*.

Every differentially simple module is a *d-MP-module*. Differential vector space over an arbitrary field is a *d-MP-module*. Any differential module M with trivial derivations is a *d-MP-module*, since $N_\# = N$ holds for each submodule N of M .

Denote by $\mathfrak{p} = (N : M)$.

Proposition 1. Let M be a *d-MP-module*. If N is a $\mathfrak{p}$ -prime differential submodule of M then $N_\#$ is a $\mathfrak{p}_\#$ -prime differential submodule of M , moreover

$$\mathfrak{p}_\# = (N : M)_\# = (N_\# : M).$$

Proof. Let $r \in (N_\# : M)$. Then $rM \subseteq N_\#$. Thus, $(rm)^{(n)} \in N$ for all $m \in M$, $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, i. e. $rm \in N$, $(rm)' = r'm + rm' \in N$, $(rm)'' = r''m + 2r'm' + rm'' \in N$, ..., $(rm)^{(n)} = \sum_{k=0}^n C_n^k r^{(n-k)} m^{(k)} \in N$. Since M is a differential module, $rm' \in N_\#$, so $rm' \in N$. By induction $r^{(i)}m^{(j)} \in N$ for all $i, j \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Then $r^{(i)}m \in N$. It follows that $r^{(i)}M \subseteq N$. Then $r^{(i)} \in (N : M)$, i. e. $r \in (N : M)_\#$.

Conversely, suppose $r \in (N : M)_\#$. Then for all $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, $r^{(n)} \in (N : M)$, i. e. $r^{(n)}M \subseteq N$. Then for all $m \in M$, $r^{(n)}m \in N$, i. e. $rm \in N$, $r'm \in N$, $r''m \in N$, and so on. Then $(rm)' = r'm + rm' \in N$. By induction it is easy to prove that $(rm)^{(n)} \in N$ for all $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Hence $r \in (N_\# : M)$.

Since N is a prime submodule of M , then $\mathfrak{p} = (N : M)$ is a prime ideal of R , so $\mathfrak{p}_\# = (N : M)_\#$ is also prime. $\square$

Remind that *Ritt algebra* is a commutative differential ring containing the field of rational numbers.

Proposition 2. A differential module over *Ritt algebra* is a *d-MP-module*.

Proof. Let $\mathcal{N}$ be a prime differential submodule of the left differential module M over the Ritt algebra R . Suppose that $m \notin \mathcal{N}_\#$ and $r \notin (\mathcal{N}_\# : M)$. Then there exist such $n, k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, that $m^{(n)} \notin \mathcal{N}$, $r^{(k)} \notin (\mathcal{N} : M)$ and for all $\alpha < n$, $\beta < k$, $m^{(\alpha)} \in \mathcal{N}$ and $r^{(\beta)} \in (\mathcal{N} : M)$. Since $\mathcal{N}$ is a prime submodule, then $r^{(k)}m^{(n)} \notin \mathcal{N}$. Then by Leibnitz rule, $(rm)^{(k+n)} = \sum_{i=0}^{k+n} C_{k+n}^i r^{(k+n-i)} m^{(i)} = \sum_{\alpha+\beta=k+n, \alpha \neq k, \beta \neq n} C_{k+n}^{\alpha} r^{(\alpha)} m^{(\beta)} + C_{k+n}^n r^{(k)} m^{(n)}$, where $C \in \mathbb{Q}$.

The first summand lies in $\mathcal{N}$ by assumption. The second summand $C_{k+n}^n r^{(k)} m^{(n)} \notin \mathcal{N}$, because $m^{(n)} \notin \mathcal{N}$ and $C_{k+n}^n r^{(k)} \notin (\mathcal{N} : M)$. Then $(rm)^{(k+n)} \notin \mathcal{N}$, i. e. $rm \notin \mathcal{N}_\#$. Therefore $\mathcal{N}_\#$ is a prime submodule of M . $\square$

It easily follows that any Ritt algebra is a d -MP-module over the field of rational numbers.

Proposition 3. *If M is a d -MP-module and N is a differential submodule of M then M/N is a d -MP-module.*

Proof. The statement follows easily from the structure of prime submodules of the factor module M/N and the definition of d -MP-module. $\square$

Proposition 4. *If N is a radical submodule of d -MP-module M then $N_\#$ is a radical submodule of M .*

Proof. Since the radical submodule coincides with the intersection of all prime submodules which contain it, and the operator $()_\#$ preserves intersections, $()_\#$ also preserves radical submodules. $\square$

Proposition 5. *If M is a d -MP-module and $f: M \rightarrow \tilde{M}$ is a differential module epimorphism then $\tilde{M}$ is a d -MP-module.*

Proof. Denote by $L = \text{Ker}(f)$. The epimorphism $f: M \rightarrow \tilde{M}$ induces a bijective correspondence

$$\bar{f}: \{\mathcal{K} \in \text{Spec}(M) \mid \text{Ker } f = L \subseteq \mathcal{K}\} \rightarrow \{\mathcal{N} \in \text{Spec}(\tilde{M})\}$$

between prime submodules $\mathcal{K}$ of the module M , containing the kernel of the homomorphism $L = \text{Ker}(f)$ and prime submodules $\mathcal{N}$ of $\tilde{M}$. Then $\bar{f} = f|_{\{\mathcal{K} \in \text{Spec}(M) \mid L \subseteq \mathcal{K}\}}$ is a bijective correspondence. Since $(0) \subseteq \mathcal{N}$, then the preimage of zero must

contain in $\mathcal{K} = \bar{f}^{-1}(\mathcal{N})$, i. e. $L \subseteq \mathcal{K}$. Then $\mathcal{N} \in \text{Spec}(\tilde{M})$, and

$$\mathcal{N}_\# = \bar{f}(\bar{f}^{-1}(\mathcal{N}_\#)) = \bar{f}((\bar{f}^{-1}(\mathcal{N}))_\#).$$

The preimage $\bar{f}^{-1}(\mathcal{N})$ of prime differential submodule is a prime differential submodule of $\tilde{M}$, and so $(\bar{f}^{-1}(\mathcal{N}))_\#$ is a prime differential submodule of M . Then $\mathcal{N}_\#$ is also a prime differential submodule of $\tilde{M}$. $\square$

Proposition 6. *Let $M_1, \dots, M_n$ is an arbitrary finite family of differential modules. Then $M = M_1 \times \dots \times M_n$ is a d -MP-module if and only if every M_i is a d -MP-module.*

Proof. Let M be a d -MP-module over R . Consider canonical projections $\pi_i: M \rightarrow M_i$. By Proposition 5, all M_i are d -MP-modules.

Conversely, suppose that $\mathcal{N}$ is a prime submodule of M , all M_i are d -MP-modules, let also $\pi_i: M \rightarrow M_i$ be canonical projections, $i = 1, 2, \dots, n$. Then $\pi_k(\mathcal{N}) = \mathcal{N}_k$ is a prime submodule of M_k for some k , $1 \leq k \leq n$ and $\pi_j(\mathcal{N}) = M_j$ for $j \neq k$. It follows that $\mathcal{N} = \pi_k^{-1}(\mathcal{N}_k)$, therefore

$$\mathcal{N}_\# = (\pi_k^{-1}(\mathcal{N}_k))_\# = \pi_k^{-1}((\mathcal{N}_k)_\#)$$

is a prime submodule since it is a preimage of the prime submodule. Therefore, each M_k is a d -MP-module. $\square$

3 Localizations of d -MP-modules

It is known that the construction of the ring of fractions of a commutative ring by a multiplicatively closed subset can be extended to the differential case by defining derivations on the ring of fractions $S^{-1}R$ in terms of derivations on R . The same is true for modules.

Let R be a differential ring with the derivation $\delta: R \rightarrow R$, M is a left differential R -module with the derivation $d: M \rightarrow M$, S is a multiplicatively closed subset of R , $s \in S$, $r \in R$, $m \in M$. Then $S^{-1}R$ -module $S^{-1}M$ is differential [2] with the derivations $\bar{\delta}: S^{-1}R \rightarrow S^{-1}R$, $\bar{d}: S^{-1}M \rightarrow S^{-1}M$, defined by

$$\bar{\delta}(r/s) = (\delta(r)s - r\delta(s))/s^2,$$

$$\bar{d}(m/s) = (d(m)s - m\delta(s))/s^2.$$

Proposition 7. Let R be a differential ring, S be a multiplicatively closed subset of R , M is a left differential R -module, S^* be a S -multiplicatively closed subset of M and $\mathcal{N}$ be a prime submodule of M , maximal in $M \setminus S^*$. Then in a differential module of fractions, the following equality for prime submodules holds

$$(S^{-1}\mathcal{N})_{\#} = S^{-1}\mathcal{N}_{\#}.$$

Proof. Let $m/s \in S^{-1}\mathcal{N}_{\#}$. Prove that $(m/s)^{(n)} \in S^{-1}\mathcal{N}$ by induction. For $n = 0$ we have $m/s \in S^{-1}\mathcal{N}$. Suppose that $(m/s)^{(k)} \in S^{-1}\mathcal{N}$ for $k < n$, where $n \geq 1$. It is easy to check that $(m/1)^{(n)} = m^{(n)}/1$ for all $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ and $m \in M$. Since $(m/s) \cdot (s/1) = m/1$ in $S^{-1}M$, then $(m/1)^{(n)} = \sum_{k=0}^{n-1} C_n^k (m/s)^{(k)} \cdot (s/1)^{(n-k)} + (m/s)^{(n)} \cdot s/1$. It follows $(m/s)^{(n)} = (m^{(n)}/1 - \sum_{k=0}^{n-1} C_n^k (m/s)^{(k)} \cdot (s^{(n-k)}/1)) \cdot (1/s)$. Then $(m/s)^{(n)} \in S^{-1}\mathcal{N}$. Therefore $S^{-1}\mathcal{N}_{\#} \subseteq (S^{-1}\mathcal{N})_{\#}$.

On the other hand, let $m/s \in (S^{-1}\mathcal{N})_{\#}$. The equality $m^{(n)}/1 = \sum_{k=0}^{n-1} C_n^k (m/s)^{(k)} \cdot (s/1)^{(n-k)} + (m/s)^{(n)} \cdot s/1$, follows that $m^{(n)}/1 \in S^{-1}\mathcal{N}$. Since $\mathcal{N}$ is a prime submodule of M , maximal among submodules not meeting S^* , then $S^{-1}\mathcal{N}$ is a prime submodule of the $S^{-1}R$ -module $S^{-1}M$ [8]. Therefore $m/s \in S^{-1}\mathcal{N}_{\#}$. $\square$

Theorem 3.1. Let M be a d -MP-module over R and let S be a multiplicatively closed subset of R . The differential module of fractions $S^{-1}M$ is a d -MP-module.

Proof. Let S^* be a S -multiplicatively closed subset of the module M and let $\mathcal{N}$ be a prime differential submodule of the differential module M , not meeting S^* . Then $\mathcal{N}_{\#}$ is also a prime submodule of M and $\mathcal{N}_{\#}$ does not meet S^* . Then $(\mathcal{N} : M) \cap S = \emptyset$ and $(\mathcal{N}_{\#} : M) \cap S = \emptyset$ [8], and $S^{-1}\mathcal{N}$ is a $S^{-1}\mathfrak{p}$ -prime submodule of the module of fractions $S^{-1}M$, $S^{-1}\mathcal{N}_{\#}$ is a $S^{-1}\mathfrak{p}_{\#}$ -prime submodule of the module of fractions $S^{-1}M$, where $\mathfrak{p} = (\mathcal{N} : M)$ [9]. By Proposition 7, $(S^{-1}\mathcal{N})_{\#} = S^{-1}\mathcal{N}_{\#}$, so $(S^{-1}\mathcal{N})_{\#}$ is a prime submodule of $S^{-1}M$, i. e. $S^{-1}M$ is a d -MP-module. $\square$

Corollary 1. A differential R -module M is a d -MP-module if and only if its localization $M_{\mathfrak{p}}$ is a d -MP-module for every prime differential ideal $\mathfrak{p}$ of the ring R .

Proof. If M is a d -MP-module, then by Theorem 3.1, each localization $R_{\mathfrak{p}}$ is a d -MP-module.

Conversely, let $\mathfrak{p}$ be a prime ideal of the differential ring R , $S = R \setminus \mathfrak{p}$, $\mathcal{N}$ be a prime submodule of the differential module M such that $\mathcal{N}_{\mathfrak{p}} \neq M_{\mathfrak{p}}$, and let $f: M \rightarrow M_{\mathfrak{p}}$ be a canonical differential module homomorphism, $f: m \mapsto m/1$. It is known that if $\mathcal{N}$ is a prime submodule of R -module M , $\mathcal{N}_{\mathfrak{p}} \neq M_{\mathfrak{p}}$, then $f^{-1}(\mathcal{N}_{\mathfrak{p}}) = \mathcal{N}$ and $\mathcal{N}_{\mathfrak{p}}$ is a prime submodule. Then $\mathcal{N}_{\#} = (f^{-1}(\mathcal{N}_{\mathfrak{p}}))_{\#} = f^{-1}((\mathcal{N}_{\mathfrak{p}})_{\#})$. Since $M_{\mathfrak{p}}$ is a d -MP-module over $R_{\mathfrak{p}}$, then the ideal $(\mathcal{N}_{\mathfrak{p}})_{\#}$ is prime in $M_{\mathfrak{p}}$, so its preimage $f^{-1}((\mathcal{N}_{\mathfrak{p}})_{\#})$ is a prime submodule of M . It follows that $\mathcal{N}_{\#}$ is a prime submodule of M , therefore M is a d -MP-module over $R_{\mathfrak{p}}$. $\square$

4 Differentially prime and quasi-prime submodules

The following theorem gives the interrelation between differentially prime and quasi-prime submodules.

Theorem 4.1. If $\mathcal{P}$ is a quasi-prime differential submodule of the differential R -module M , then $\mathcal{P}$ is a differentially prime submodule of M .

Proof. Let $\mathcal{P}$ be a quasi-prime submodule of the differential module M . Suppose that it is not differentially prime. Then there exist $r \in R$, $m \in M$ such that $[r] \cdot [m] \subseteq \mathcal{P}$ and $r \notin (\mathcal{P} : M) = \mathfrak{p}$, $m \notin \mathcal{P}$, i.e. $r \in R \setminus \mathfrak{p}$, $m \in M \setminus \mathcal{P}$ and $[r] \cdot [m] \subseteq \mathcal{P}$. It is clear that $\mathcal{P} \subset \mathcal{P} + [m]$ and $\mathfrak{p} \subset \mathfrak{p} + [r]$ and $(\mathcal{P} : M) + [r]$ is a differential ideal of R , $\mathcal{P} + [m]$ is a differential submodule of M . Since $\mathcal{P}$ is maximal among the differential submodule not meeting some Sm -system S^* , $(\mathfrak{p} + [r]) \cap S \neq \emptyset$ and $(\mathcal{P} + [m]) \cap S^* \neq \emptyset$. Therefore there exist $s \in S$, $x \in S^*$ such that $s \in \mathfrak{p} + [r]$ and $x \in \mathcal{P} + [m]$. On the other hand, S^* is a Sm -system and $s \in S$, $x \in S^*$ follows the existence of the element $a \in R$ such that $sax \in S^*$. Then $sax \in (\mathfrak{p} + [r]) \cdot (\mathcal{P} + [m]) = \mathfrak{p} + [r] \cdot [m] \subseteq \mathcal{P}$. So $sax \in S^* \cap \mathcal{P} \neq \emptyset$, but it contradicts the assumption that $S^* \cap \mathcal{P} = \emptyset$. Hence $\mathcal{P}$ is a differentially prime submodule. $\square$

Corollary 2. If every differentially prime submodule of the differential module M is prime, then the module M is a d -MP-module.

Proof. Since every differentially prime submodule is prime, then every quasi-prime submodule is prime. It is equivalent to the fact that the submodule is d -MP. $\square$

5 Ultraproducts of d -MP-modules

Given a family $\{M_i\}_{i \in I}$ of differential modules indexed by an infinite set I endowed by non-principal ultrafilter $\mathcal{U}$ over I . Let each (M_i, d_i) be a differential module over the differential ring (R_i, δ_i) . The *ultraproduct* $M^* = \prod_{i \in I} M_i / \mathcal{U}$ of the family $\{M_i\}_{i \in I}$ with respect to $\mathcal{U}$ is the quotient of the cartesian product $\prod_{i \in I} M_i$ modulo the ideal of all sequences $(m_i)_{i \in I}$ almost all of its entries are zero, i. e. the set of indices $i \in I$ such that $m_i = 0$ belongs to the ultrafilter $\mathcal{U}$.

It is easy to see that an ultraproduct $M^* = \prod_{i \in I} M_i / \mathcal{U}$ of a family $\{M_i\}_{i \in I}$ of left differential modules is a left differential module over the differential ring $R^* = \prod_{i \in I} R_i / \mathcal{U}$; the derivation $d^*: M^* \rightarrow M^*$ on the ultraproduct M^* is defined by

$$d^*[(m_i)_{i \in I}] = [(d_i(m_i))_{i \in I}],$$

the derivation on R^* is $\delta^*: R^* \rightarrow R^*$ defined by

$$\delta^*[(m_i)_{i \in I}] = [(\delta_i(m_i))_{i \in I}].$$

Suppose that for each $i \in I$ N_i is a submodule of the differential R_i -module M_i . One can construct a submodule $N^* = \prod_{i \in I} N_i / \mathcal{U}$ of the ultraproduct $\prod_{i \in I} M_i / \mathcal{U}$, which is an internal ultraproduct of the family of submodules $\{N_i\}_{i \in I}$ with respect to $\mathcal{U}$ [11]. Then $N^* = \{(m_i)_{i \in I} \mid \{i \mid m_i \in N_i, i \in I\} \in \mathcal{U}\}$. It is differential if and only if all N_i are differential, $i \in I$.

Proposition 8. Let $N^* = \prod_{i \in I} N_i / \mathcal{U}$ be a submodule of $M^* = \prod_{i \in I} M_i / \mathcal{U}$. Then

$$(N^*)_{\#} = (\prod_{i \in I} N_i / \mathcal{U})_{\#} = \prod_{i \in I} (N_i)_{\#} / \mathcal{U}.$$

Proof. It follows from the properties of $(\cdot)_{\#}$ -operator and the fact that any prime differential submodule is an internal ultraproduct of any family of differentially prime submodules. $\square$

Theorem 5.1. The ultraproduct of any family of d -MP-modules with respect to the nonprincipal ultrafilter is a d -MP-module.

Proof. Let $\{M_i\}_{i \in I}$ be a family of d -MP-modules over R_i , $i \in I$. Let $N^* = \prod_{i \in I} N_i / \mathcal{U}$ be a prime differential submodule of $M^* = \prod_{i \in I} M_i / \mathcal{U}$. Then by Proposition 8 $(N^*)_{\#}$ is a prime differential submodule of M^* , so M^* is a d -MP-module. $\square$

References

1. Gorman H. Radical regularity in differential rings // *Canad. J. Math.* – 1971. – 23, No. 2. – P. 197-201.
2. Gorman H. Differential rings and modules // *Scripta Math.* – 1973. – 29 No. 1-2. – P. 25-35.
3. Nowicki A., Some remarks on d -MP rings // *Bull. Acad. pol. sci., Ser. sci. math.* – 1982. – 30, No. 7-8. – P. 311-317.
4. Keigher W. F. Quasi-prime ideals in differential rings // *Houston J. Math.* – 1978. – Vol. 4, №3. – P. 379-388.
5. Kaplansky I. Introduction to differential algebra, Graduate Texts in Mathematics, vol. 189. – New York: Springer-Verlag, 1999. – 85 p.
6. Kolchin S. E. Differential Algebra and Algebraic Groups. – New York: Academic Press, 1973. – 446p.
7. Khadjiev Dj., Çalhalp F., On a differential analog of the prime-radical and properties of the lattice of the radical differential ideals in associative differential rings // *Tr. J. of Math.* – 1996. – Vol. 20, №4. – pp. 571-582.
8. Lu C. P. Unions of prime submodules // *Houston Journal of Mathematics.* – 1997. – Vol. 23, No. 2. – P. 203-213.
9. Lu C. P. Spectra of modules // *Comm. Algebra.* – 1995. – Vol. 23. – P. 3741-3752.
10. Melnyk I. O. Sdm -systems, differentially prime and differentially primary modules (Ukrainian) // *Nauk. visnyk Uzhgorod. Univ. Ser. Math. and informat.* – 2008. – Vol. 16. – P. 110-118.
11. Olberding B., Saydam S. Ultraproducts of commutative rings, in: *Commutative Ring Theory and Applications*, in: *Lecture Notes in Pure and Appl. Math.*, vol. 231, Dekker, 2002, pp. 369-387.

Надійшла до редколегії 30.04.2009

УДК 519.5

Т.А. Мельник, професор

А.В. Попов, аспірант

Асимптотичні розв'язки крайових задач в тонких перфорованих областях з швидко змінною товщиною та різними граничними розмірностями

Вивчено асимптотичну поведінку розв'язків різних крайових задач для симетричного рівномірно еліптичного оператора другого порядку з швидко осцилюючими коефіцієнтами в тонких перфорованих областях з швидко змінною товщиною та різними граничними розмірностями.

Ключові слова: асимптотичне наближення, асимптотичне розв'язання, усереднення, тонка перфорована область

E-mail: melnyk@imath.kiev.ua, popov256@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

T.A. Mel'nyk, Professor

A.V. Popov, PhD student

Asymptotic solutions of boundary value problems in thin perforated domains with rapidly varying thickness and with different limiting dimensions

We study the asymptotic behavior of solutions of different boundary-value problems for the second-order symmetric elliptic differential operator with quickly oscillating coefficients in thin perforated domains with rapidly varying thickness and with different limiting dimensions.

Key Words: asymptotic approximation, asymptotic expansion, homogenization, thin perforated domain.

1 Introduction

A rigorous asymptotic method for constructing approximations in thin domains was first suggested by Gol'denveizer [4]. This method was developed for thin domains of cylindrical type in [5, 7, 11, 14], where the main idea was to make a special change of variables such that the stretched domain becomes independent of a small parameter. Then the small parameter appears at the higher-order derivatives in the equations, which makes it possible to apply the Vishik-Lyusternik method. This approach does not work in the case of a thin perforated domain of rapidly varying thickness. Paper [13] is the first where the homogenization method for thin domains was applied. Boundary-value problems in thin elastic domains with periodic structure was studied in [6, 15]. In [8], the first author of this paper considered elliptic and spectral problems with rapidly oscillating coefficients in a thin perforated domains of rapidly varying thickness with the limiting dimension 1. In this paper we generalize some results of paper [8] for boundary-value problems in thin perforated domains with different limiting dimensions; in addition we construct and justify the full asymptotic expansions for solutions in special case. In the recent monograph [9] different methods of investigating boundary value problems

in thin domains are described in detail.

Description of a thin perforated domain.

Let $\xi \in \mathbb{R}^n$, $d, n \in \mathbb{N}$, and $n > d$. Let us define $\xi' := (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n-d}) \in \mathbb{R}^{n-d}$. Let $h_{\pm}^{(1)}(\xi')$, $h_{\pm}^{(2)}(\xi')$, $\dots$, $h_{\pm}^{(d)}(\xi')$ be smooth positive functions that are 1-periodic in all the variables. We consider the domain

$$\omega = \{\xi \in \mathbb{R}^n : -h_{-}^{(k)}(\xi') < \xi_{n-d+k} < h_{+}^{(k)}(\xi'), \\ k = 1, \dots, d, \quad 0 < \xi_i < 1, \quad i = 1, \dots, n-d\}.$$

Let T_0 be a finite family of closed domains with boundary of class $C^{2,\alpha}$ such that the domains lie in ω and are disjoint. We denote $\omega_0 = \omega \setminus T_0$, $T_0^\varepsilon = \varepsilon \cdot T_0 = \{x : \varepsilon^{-1}x \in T_0\}$, $T^\varepsilon = \bigcup_{z_0 \in \mathbb{Z}^n} (T_0^\varepsilon + \varepsilon z_0)$, where the union $\bigcup$ is taken over vectors $z_0 = (z_1, \dots, z_{n-d}, 0, \dots, 0) \in \mathbb{Z}^n$ with integer-valued components and ε is a small positive parameter. Also we will denote $x'' := (x_{n-d+1}, x_{n-d+2}, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^d$.

Let Ω be a bounded domain in $\mathbb{R}^{n-d}$ with smooth boundary. A model thin perforated domain is defined as follows $\Omega_\varepsilon = Q_\varepsilon \setminus T^\varepsilon$, where

$$Q_\varepsilon = \left\{ x = (x', x'') \in \mathbb{R}^n : x' \in \Omega, \right. \\ \left. -\varepsilon h_{-}^{(k)}\left(\frac{x'}{\varepsilon}\right) < x_{n-d+k} < \varepsilon h_{+}^{(k)}\left(\frac{x'}{\varepsilon}\right), \quad k = \overline{1, d} \right\}.$$

Assume also that $\partial T_\varepsilon \cap \partial \Omega = \emptyset$. We see that the thin perforated domain Ω_ε singularly generates into domain Ω in $\mathbb{R}^{n-d}$ as ε tends to zero. The number $n-d$ is called the limiting dimension of the thin domain Ω_ε .

For parts of the boundary of Ω_ε we introduce the notation

$$\begin{aligned} S_\varepsilon^{\pm, i} &= \left\{ x : x' \in \Omega, \quad x_{n-d+i} = \pm \varepsilon h_\pm^{(i)}\left(\frac{x'}{\varepsilon}\right), \right. \\ &\quad \left. -\varepsilon h_-^{(k)}\left(\frac{x'}{\varepsilon}\right) < x_{n-d+k} < \varepsilon h_+^{(k)}\left(\frac{x'}{\varepsilon}\right), \right. \\ &\quad \left. k = \overline{1, d}, i \neq k \right\}, \quad S_\varepsilon^\pm = \bigcup_{i=1}^d S_\varepsilon^{\pm, i}, \\ G_\varepsilon &= \partial T_\varepsilon \cap Q_\varepsilon, \quad \Gamma_\varepsilon = \partial \Omega_\varepsilon \setminus (S_\varepsilon^\pm \cup Q_\varepsilon). \end{aligned}$$

2 Approximation in general case

In domain Ω_ε we consider the following problem

$$\begin{cases} L_\varepsilon(u_\varepsilon) = f_\varepsilon & \text{in } \Omega_\varepsilon, \\ \sigma_\varepsilon(u_\varepsilon) = \varepsilon \rho_\varepsilon & \text{on } G_\varepsilon, \\ \sigma_\varepsilon(u_\varepsilon) = \varepsilon g_\varepsilon^\pm & \text{on } S_\varepsilon^\pm, \\ u_\varepsilon = \varphi_0 & \text{on } \Gamma_\varepsilon, \end{cases} \quad (1)$$

where L_ε is symmetric uniformly elliptic differential operator (cf. [2]) and

$$L_\varepsilon(u) \equiv \partial_{x_i} (a_{ij}(\frac{x}{\varepsilon}) \partial_{x_j} u),$$

$\sigma_\varepsilon(u_\varepsilon) \equiv a_{ij}(\frac{x}{\varepsilon}) \partial_{x_j} u_\varepsilon \nu_i(\frac{x}{\varepsilon})$ is the conormal derivative and $(\nu_1, \dots, \nu_n)$ is the unit outward normal to $\partial \Omega_\varepsilon$. Here and in what follows we assume the summation over repeated indices from 1 to n .

The functions $a_{ij}(\xi)$, $f(x', \xi)$, $\rho(x', \xi)$, $g^\pm(x', \xi)$, $(\xi \in \mathbb{R}^n, x' \in \mathbb{R}^{n-d})$ are 1-periodic with respect to the variables $\xi_1, \dots, \xi_{n-d}$ and possess the first order derivatives with respect to x which, as well as the functions themselves, belong to $C^{0,\alpha}$, $C^{1,\alpha}$ relative to ξ uniformly with respect to x' ; $\varphi_0 \in H^3(\Omega)$. We introduce the following notations $a_{ij}^\varepsilon = a_{ij}(\frac{x}{\varepsilon})$, $f_\varepsilon = f(x', \frac{x}{\varepsilon})$, $\rho_\varepsilon = \rho(x', \frac{x}{\varepsilon})$, $g_\varepsilon^\pm = g^\pm(x', \frac{x}{\varepsilon})$.

Recall that $u_\varepsilon \in H^1(\Omega_\varepsilon)$ is a weak solution to problem (1) for fixed ε if the trace $u_\varepsilon|_{\Gamma_\varepsilon} = \varphi_0$ and for any $\psi \in H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon) = \{u \in H^1(\Omega_\varepsilon) : u|_{\Gamma_\varepsilon} = 0\}$ the following identity is satisfied

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\varepsilon} a_{ij}^\varepsilon \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial x_i} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} dx &= - \int_{\Omega_\varepsilon} f_\varepsilon \psi dx + \\ &+ \varepsilon \int_{S_\varepsilon^\pm} g_\varepsilon^\pm \psi d\sigma_x + \varepsilon \int_{G_\varepsilon} \rho_\varepsilon \psi d\sigma_x. \end{aligned}$$

The aim of this section is to construct the asymptotic approximation for the solution to problem (1) if $\varepsilon \rightarrow 0$. It should be noted that similar problem, but in a thin perforated domain with the limiting dimension $n-1$ and with the homogeneous Neumann conditions on G_ε , was considered in [8].

2.1 Auxiliary inequalities

Similarly as in [8] we prove the following estimates

$$\|u\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} \leq c_1 \|\nabla_x u\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)}, \quad (2)$$

$$\|u\|_{L^2(S_\varepsilon^\pm)} \leq c_2 \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \|u\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)}, \quad (3)$$

$$\|u\|_{L^2(G_\varepsilon)} \leq c_3 \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \|u\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} \quad (4)$$

for any function $u \in H^1(\Omega_\varepsilon)$, in (2) $u \in H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon)$. Hereafter all constants $\{c_i\}$ are independent of u and ε .

Using standard approach in the theory of elliptic boundary-value problems, we prove the existence and uniqueness of the solutions to problem (1) and with the help of (2) - (4) deduce the following estimate

$$\begin{aligned} \|u_\varepsilon\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} &\leq c_4 \left(\|f_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} + \|\varphi_0\|_{H^1(\Omega)} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\varepsilon} \|g_\varepsilon^\pm\|_{L^2(S_\varepsilon^\pm)} + \sqrt{\varepsilon} \|\rho_\varepsilon\|_{L^2(G_\varepsilon)} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

2.2 The homogenized problem

Consider the following problem on the periodicity cell: find a function N that is 1-periodic with respect to each of the variables $\xi_1, \dots, \xi_{n-d}$ and such that

$$\begin{cases} L_{\xi\xi} N(\xi) = F_0(\xi) + \sum_{i=1}^n \partial_{\xi_i} F_i(\xi), & \xi \in \omega_0, \\ \sigma_\xi(N(\xi)) = \Phi_0^\pm(\xi) + \sum_{i=1}^n F_i(\xi) \nu_i(\xi), & \xi \in S^\pm, \\ \sigma_\xi(N(\xi)) = \Phi_1(\xi) + \sum_{i=1}^n F_i(\xi) \nu_i(\xi), & \xi \in \partial T_0, \\ \langle N \rangle_{\omega_0} := \frac{1}{|\omega_0|} \int_{\omega_0} N(\xi) d\xi = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Here $L_{\xi\xi}(N) = \partial_{\xi_i} (a_{ij} \partial_{\xi_j} N)$, $\sigma_\xi(N) = a_{ij} \partial_{\xi_j} N \nu_i(\xi)$; $(\nu_1(\xi), \dots, \nu_n(\xi))$ is the unit outward normal to $\partial \omega_0$ and $|\omega_0|$ is the Lebesgue measure of ω_0 ; $\{F_0, F_1, \dots, F_n\} \subset L^2(\omega_0)$; $S^\pm = \{\xi : \xi' \in [0, 1]^{n-d}, \xi_{n-d+i} = \pm h_\pm^{(i)}(\xi')\}$, $i = \overline{1, d}$; $\Phi_0^\pm \in L^2(S^\pm)$; $\Phi_1 \in L^2(\partial T_0)$; $\Gamma = \partial \omega_0 \setminus (S^\pm \cup \partial T_0)$; $\partial_x F := \frac{\partial F}{\partial x}$.

Definition 2.1. A function $N \in H_{\#}^1(\omega_0)$ is called a weak solution to the problem (6), if for any $\psi \in H_{\#}^1(\omega_0)$

$$\int_{\omega_0} a_{ij} \partial_{\xi_j} N \partial_{\xi_i} \psi d\xi = \sum_{i=1}^n \int_{\omega_0} F_i \partial_{\xi_i} \psi d\xi - \int_{\omega_0} F_0 \psi d\xi + \int_{\partial T_0} \Phi_1 \psi d\sigma + \int_{S^{\pm}} \Phi_0^{\pm} \psi d\sigma, \quad (7)$$

where $H_{\#}^1(\omega_0)$ is the subspace of functions in $H^1(\omega_0)$, that are 1-periodic with respect to $\xi_1, \dots, \xi_{n-d}$.

According to [2, p. 339], the problem (6) has a unique weak solution if and only if

$$\int_{\omega_0} F_0(\xi) d\xi = \int_{S^+} \Phi_0^+(\xi) d\sigma + \int_{S^-} \Phi_0^-(\xi) d\sigma + \int_{\partial T_0} \Phi_1(\xi) d\sigma. \quad (8)$$

Furthermore, the following estimate holds:

$$\|N\|_{H^1(\omega_0)} \leq C \left(\sum_{i=0}^n \|F_i\|_{L^2(\omega_0)} + \|\Phi_1\|_{L^2(\partial T_0)} + \|\Phi_0^{\pm}\|_{L^2(S^{\pm})} \right),$$

where the constant C is independent of $N, \{F_i\}, \Phi_0^{\pm}, \Phi_1$.

We define weak solutions $N_p \in H_{\#}^1(\omega_0)$, $p = 1, \dots, n-d$, of the problems

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(N_p(\xi)) = -\partial_{\xi_i} a_{ip}(\xi), & \xi \in \omega_0, \\ \sigma_{\xi}(N_p(\xi)) = -a_{ip}(\xi) \nu_i(\xi), & \xi \in S^{\pm} \cup \partial T_0, \\ \langle N_p \rangle_{\omega_0} = 0. \end{cases} \quad (9)$$

With the help of the solutions to problem (9), we introduce the differential operator

$$\begin{aligned} \widehat{L}(N) &= \sum_{p,q=1}^{n-d} \partial_{x_q} \left(\widehat{a}_{pq} \partial_{x_p} N \right), \\ \widehat{a}_{pq} &= \left\langle a_{pq} + \sum_{j=1}^n a_{pj} \partial_{\xi_j} N_p \right\rangle_{\omega_0} \end{aligned} \quad (10)$$

As in [2, p. 124] we check that the coefficients of $\widehat{L}$ satisfy the symmetry and ellipticity conditions. Operator $\widehat{L}$ is called the *homogenized differential operator* for operator L_{ε} .

Consider the problem

$$\begin{cases} \widehat{L}(u_0(x')) = \widehat{F}(x'), & x' \in \Omega, \\ u_0(x') = \varphi_0(x'), & x' \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (11)$$

where

$$\begin{aligned} \widehat{F}(x') &= \langle f(x', \cdot) \rangle_{\omega_0} - \\ &- \frac{1}{|\omega_0|} \left(\int_{S^{\pm}} g^{\pm}(x', \xi) dS_{\xi} + \int_{\partial T_0} \rho(x', \xi) dS_{\xi} \right). \end{aligned}$$

Lemma 2.1. For any function $u \in H^1(\Omega_{\varepsilon}, \Gamma_{\varepsilon})$ and for sufficiently small ε the following estimate holds:

$$\left| \int_{\Omega_{\varepsilon}} f_{\varepsilon} u dx - \varepsilon \left(\int_{S_{\varepsilon}^{\pm}} g_{\varepsilon}^{\pm} u d\sigma_x + \int_{G_{\varepsilon}} \rho_{\varepsilon} u d\sigma_x \right) - \int_{\Omega_{\varepsilon}} \widehat{F} u dx \right| \leq c_3 \varepsilon^{1+d/2} \|u\|_{H^1(\Omega_{\varepsilon}, \Gamma_{\varepsilon})}. \quad (12)$$

Thus, the right-hand side of (11) is close to the right-hand sides of (1) in the sense of Lemma 2.1. We will call the problem (11) as the homogenized problem for the problem (1).

2.3 Asymptotic approximation

Consider the following function

$$\widetilde{U}_{\varepsilon} = u_0(x') + \varepsilon \sum_{p=1}^{n-d} N_p \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{\partial u_0(x')}{\partial x_p}, \quad (13)$$

where u_0 is the solution to problem (11) and N_p , $p = 1, \dots, n-d$, are the solutions to problems (9) respectively.

By the same way as in [8] (see also [16]) we prove the following theorem.

Theorem 2.1. There exist positive constants c, ε_0 such that for all $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$

$$\|u_{\varepsilon} - \widetilde{U}_{\varepsilon}\|_{H^1(\Omega_{\varepsilon})} \leq c \varepsilon^{\frac{d}{2} + \frac{1}{2}}. \quad (14)$$

3 Construction and justification of the asymptotic expansion in the special symmetric case

In this section, we assume that $\Omega = \{x' \in \mathbb{R}^{n-d} : x_i \in (0, 1), i = 1, \dots, n-d\}$, is an $(n-d)$ -dimensional unit cube and the periodicity cell ω_0 is symmetric with respect to the hyperplanes $\xi_i = \frac{1}{2}$, $i = 1, \dots, n-d$. Also we assume that for any $\xi \in \mathbb{R}^n$ the coefficients a_{ij} of L_{ε} satisfy the following symmetry conditions with respect to ξ' :

$$a_{ij}(S'_h \xi) = (-1)^{\delta_{i,h} + \delta_{j,h}} a_{ij}(\xi), \quad \forall h = \overline{1, n-d},$$

where $\delta_{i,h}$ is the Kronecker symbol and $S'_h \xi = ((-1)^{\delta_{1,h}} \xi_1, \dots, (-1)^{\delta_{n-d,h}} \xi_{n-d}, \xi_{n-d+1}, \dots, \xi_n)$.

In the domain Ω_ε we consider the problem:

$$\begin{cases} L_\varepsilon(u_\varepsilon(x)) = -f(x') & x \in \Omega_\varepsilon, \\ \sigma_\varepsilon(u_\varepsilon(x)) = \varepsilon k_0 \left(\frac{x}{\varepsilon}\right) u_\varepsilon(x) & x \in G_\varepsilon, \\ \sigma_\varepsilon(u_\varepsilon(x)) = \varepsilon k^\pm \left(\frac{x}{\varepsilon}\right) u_\varepsilon(x) & x \in S_\varepsilon^\pm, \\ u_\varepsilon(x) = 0 & x \in \Gamma_\varepsilon, \end{cases} \quad (15)$$

where $f \in C_0^\infty(\Omega)$, and $k_0(\xi)$, $k^\pm(\xi)$, $\xi \in \mathbb{R}^n$ are smooth, 1-periodic, positive and even with respect to all the variables $\xi_1, \dots, \xi_{n-d}$ functions.

3.1 Formal asymptotic expansion

The asymptotic ansatz is as follows

$$u_\infty(x', \frac{x}{\varepsilon}) := \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \sum_{|\alpha|=k} N_\alpha \left(\frac{x}{\varepsilon}\right) D^\alpha v_\varepsilon(x'), \quad (16)$$

where $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_k)$ is a multiindex of length $|\alpha| = k$, where $\alpha_i \in \{0, 1, \dots, n-d\}$; $N_\alpha(\xi)$, $\xi \in \mathbb{R}^n$, are smooth, 1-periodic with respect to ξ' functions; $N_0 \equiv 1$; $D^\alpha v \equiv \frac{\partial^k v}{\partial x_{\alpha_1} \dots \partial x_{\alpha_k}}$, $D^0 v \equiv v$.

Acting formally on u_∞ with the operators L_ε , σ_ε and collecting coefficients at the same order of ε , we gain such recurrent procedure to determine functions N_α :

$$\begin{cases} L_{\xi\xi} N_\alpha(\xi) + M_\alpha(\xi) = h_\alpha, & \xi \in \omega_0; \\ \sigma_\xi(N_\alpha(\xi)) + T_\alpha^\pm(\xi) = 0, & \xi \in S^\pm; \\ \sigma_\xi(N_\alpha(\xi)) + T_\alpha^0(\xi) = 0, & \xi \in \partial T_0; \\ \langle N_\alpha \rangle_{\omega_0} = 0. \end{cases} \quad (17)$$

Here

$$M_\alpha = \sum_{i=1}^n (a_{\alpha_1 i} \partial_{\xi_i} N_{\alpha_2 \dots \alpha_k} + \partial_{\xi_i} (a_{i \alpha_1} N_{\alpha_2 \dots \alpha_k})) + a_{\alpha_1 \alpha_2} N_{\alpha_3 \dots \alpha_k},$$

$$T_\alpha^0 = \sum_{i=1}^n a_{i \alpha_1} \nu_i N_{\alpha_2 \dots \alpha_k} - \delta_{\alpha_1, 0} \delta_{\alpha_2, 0} \cdot k_0 N_{\alpha_3 \dots \alpha_k},$$

$$T_\alpha^\pm = \sum_{i=1}^n a_{i \alpha_1} \nu_i N_{\alpha_2 \dots \alpha_k} - \delta_{\alpha_1, 0} \delta_{\alpha_2, 0} \cdot k^\pm N_{\alpha_3 \dots \alpha_k}.$$

This recurrent procedure is uniquely solvable provided that

$$h_\alpha = \left\langle \sum_{i=1}^n a_{i \alpha_1} \partial_{\xi_i} N_{\alpha_2 \dots \alpha_k} + a_{\alpha_1 \alpha_2} N_{\alpha_3 \dots \alpha_k} \right\rangle_{\omega_0} + \frac{\delta_{\alpha_1, 0} \delta_{\alpha_2, 0}}{|\omega_0|} \int_{\partial T_0} k_0 N_{\alpha_3 \dots \alpha_k} d\sigma + \frac{\delta_{\alpha_1, 0} \delta_{\alpha_2, 0}}{|\omega_0|} \int_{S^\pm} k^\pm N_{\alpha_3 \dots \alpha_k} d\sigma. \quad (18)$$

Similarly as in the second part of paper [16] we prove the following statements.

Proposition 3.1. *The functions N_α and constants h_α have the following properties:*

$$N_\alpha(S'_h \xi) = (-1)^{\delta_{\alpha_1, h} + \dots + \delta_{\alpha_k, h}} N_\alpha(\xi), \quad \xi \in \omega_0, \quad h = \overline{1, n-d}; \quad (a)$$

$$N_\alpha \equiv 0, \text{ if the collection of indices } \alpha_1 \dots \alpha_k \text{ contains an odd number of zeros}; \quad (b)$$

$$h_\alpha = 0, \text{ if } (-1)^{\delta_{\alpha_1, h} + \dots + \delta_{\alpha_k, h}} = -1 \text{ at least for one } h \in \{1, \dots, n-d\}; \quad (c)$$

$$h_\alpha = 0 \text{ for odd } |\alpha|. \quad (d)$$

Remark 3.1. *By (c), the symmetry of the coefficients of the problem implies that the homogenized operator has the form $\hat{L} = \sum_{p=1}^{n-d} \hat{a}_{pp} \frac{\partial^2}{\partial x_p^2}$.*

We look for an asymptotic expansion of v_ε in the form: $v_\varepsilon(x') = \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon^{2m} v_m(x')$, $x' \in \Omega$. Substituting this expression into (16), the equation of the problem (15) and equating the coefficients at equal powers of ε , we obtain a recurrent procedure for determining the functions $\{v_k\}_{k=0}^{\infty}$:

$$\begin{cases} \hat{L}(v_k(x')) + \hat{K}v_k(x') = f_k(x'), & x' \in \Omega, \\ v_k(x') = 0, & x' \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (19)$$

where $f_0(x') = -f(x')$,

$$f_k(x') = - \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{|\alpha|=2(k-m)+2} h_\alpha D^\alpha v_m(x').$$

Remark 3.2. *From the boundary conditions of the problem (19) it follows that all the derivatives of $v_k|_{x_i=0}$, $v_k|_{x_i=1}$ with respect to all the variables except for x_i , also vanish on the faces $\{x_i = 0\}$ and $\{x_i = 1\}$ of the $(n-d)$ -dimensional cube Ω .*

Lemma 3.1. *For any $k, l \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ the solutions to the recurrent procedure (19) satisfy the following relations on the opposite faces of cube Ω*

$$\frac{\partial^{2l} v_k}{\partial x_i^{2l}} \Big|_{x_i=0} = \frac{\partial^{2l} v_k}{\partial x_i^{2l}} \Big|_{x_i=1} = 0, \quad i = \overline{1, n-d}.$$

3.2 Justification of asymptotic expansion

Theorem 3.1. *The solution to problem (15) admits the following asymptotic expansion in the space $H^1(\Omega_\varepsilon)$:*

$$u_\varepsilon(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \sum_{|\alpha|=k} N_\alpha \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) D^\alpha v_\varepsilon(x'),$$

$$v_\varepsilon(x') = \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon^{2m} v_m(x') \quad (\varepsilon \rightarrow 0),$$

where N_α are determined by the recurrent procedure (17), and v_m are found by the recurrent procedure (19). Also for every odd p the following estimate holds

$$\|S_p^{(\varepsilon)} - u_\varepsilon\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} \leq C_p \varepsilon^{p+\frac{3}{2}-1}, \quad (20)$$

where $S_p^{(\varepsilon)}(x) = \sum_{k=0}^p \varepsilon^k \sum_{|\alpha|=k} N_\alpha \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) D^\alpha V_{p-1}^{(\varepsilon)}(x')$,

$$V_{p-1}^{(\varepsilon)}(x') = \sum_{m=0}^{(p-1)/2} \varepsilon^{2m} v_m(x')$$

To prove this theorem we substitute the partial sum $S_p^{(\varepsilon)}$ into (15) and find its residuals in the differential equation and boundary conditions of problem (15). Then with the help of (2)-(5) we deduce estimate (20).

References

1. S. Agmon, A. Douglis, L. Nirenberg, *Estimates of Solutions to Elliptic Equations Near the Boundary*, IL, Moscow (1962)
2. N. S. Bakhvalov and G. P. Panasenko, *Homogenization: Averaging Processes* [in Russian], Nauka, Moscow (1984)
3. A. B. Vasil'eva, V. F. Butuzov, *Asymptotic Methods in the Theory of Singular Perturbations*, Vyssh. Shkola, Moscow (1990)
4. A. L. Gol'denveizer, *The Theory of Elastic Thin Shells*, Nauka, Moscow (1976)
5. M. G. Dzhavadov, "Asymptotics of solutions of a boundary-value problem for second-order elliptic equations in thin domains [in Russian], *Differ. Urav.* 4, No. 10, 1901-1909 (1968)
6. A. G. Kolpakov, "The governing equations of a thin elastic stressed beam with a periodic structure" [in Russian], *Prikl. Mat. Mekh.*, 63, No. 3, 513-523 (1999)
7. S. N. Leora, S. A. Nazarov, A. V. Proskura, "Derivation of limiting equations for elliptic problems in thin domains using computers [in Russian], *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* 26, No. 7, 1032-1048 (1986)
8. T. A. Mel'nyk, "Averaging of elliptic equations describing processes in strongly inhomogeneous thin perforated domains with rapidly changing thickness" [in Russian], *Akad. Nauk Ukr. SSR* 10, 15-18 (1991)
9. S. A. Nazarov, *Asymptotic Theory of Thin Plates and Rods. Vol. 1. Dimension Reduction and Integral Estimates*, Nauchnaya Kniga (IDMI), Novosibirsk (2002)
10. S. A. Nazarov, "General averaging procedure for selfadjoint elliptic systems in many-dimensional domains, including thin ones" [in Russian], *Algebra Anal.* 7, No. 5, 1-92 (1995)
11. S. A. Nazarov, "The structure of the solutions of elliptic boundary value problems in thin domains" [in Russian], *B Vestn. Leningr. Univ. Ser. Mat. Mekh. Astron.* No. 2, 65-68 (1982)
12. O. A. Oleinik, A. S. Shamaev, G. A. Yosifyan, *Mathematical Problems in the Theory of Strongly Inhomogeneous Elastic Media*, Moscow Univ. Press, Moscow (1990)
13. G. P. Panasenko, M. V. Reztsov, "Averaging a three-dimensional problem of elasticity theory in an inhomogeneous plate *Dokl. Akad. SSSR.* 294, No. 5, 1061-1065 (1987)
14. Caillerie D. "Thin elastic and periodic plates" *Math. Methods Appl. Sci.* - 1984. - Vol.6. - P. 159-191
15. Korn R.V., Vogelius M. "A new model for thin plates with rapidly varying thickness. II: A convergence proof" *Quarterly of applied mathematics.* - 1985. - Vol. 18, № 1. - P.1-22
16. T.A. Mel'nyk, A.V. Popov, "Asymptotic analysis of boundary-valued problems in thin perforated domains with rapidly varying thickness" *Nonlinear oscillations* - 2010, Vol.13, № 1, P.50-74

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 519.21

Т.А.Мельник
О.А.Сівак, аспірант

Асимптотичний розклад розв'язку еліптичної задачі з багатозафазними крайовими взаємодіями типу умов Діріхле та Неймана в перфорованій області

Розглядається крайова задача для еліптичного диференціального оператора другого порядку з швидко осцилюючими коефіцієнтами в області Ω_ε , яка ε -періодично перфорована малими порожнинами діаметру $O(\varepsilon)$. Порожнини поділяються на три ε -періодичні набори в залежності від взаємодії через поверхні їх меж. На межах одного набору порожнин задані однорідні умови Діріхле, на межах інших порожнин задані різні неоднорідні умови Неймана, в які входять додаткові параметри збурення. Використовуючи метод двомасштабних розв'язків побудовано і обґрунтовано повне асимптотичне розв'язання для розв'язку задачі.

Ключові слова: асимптотичне розв'язання, усереднення, перфорована область

E-mail: melnyk@imath.kiev.ua, o.a.sivak@gmail.com
Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction and statement

In recent years, a rich collection of new results on asymptotic analysis of boundary-value problems in perforated domains is appeared (see for example [1]-[4] and references there). In this paper we generalize the result by J.L. Lions (see [5]), where asymptotic expansion was constructed for the solution to the Poisson equation in a perforated domain with the homogeneous Dirichlet and Neumann conditions. Asymptotic analysis of an elliptic problem with the nonlinear boundary multiphase interactions of the Robin type in a perforated domain was made in [6].

Let B be a finite union of smooth disjoint nontangent domains strictly lying in the unit square $\square := \{\xi \in \mathbb{R}^n : 0 < \xi_i < 1, i = \overline{1, n}\}$. In an arbitrary way, we divide B into three sets,

T.A.Mel'nyk
O.A.Sivak, PhD student.

Asymptotic expansion for the solution of an elliptic problem with boundary multiphase interactions of the Dirichlet and Neumann types in a perforated domain

We consider a boundary-value problem for the second order elliptic differential operator with rapidly oscillating coefficients in a domain Ω_ε that is ε -periodically perforated by small holes of order $O(\varepsilon)$. The holes are divided into three ε -periodical sets depending on the boundary interaction at their surfaces. On the boundaries of holes from one set we have the homogeneous Dirichlet conditions. On the boundaries of the others, different inhomogeneous Neumann boundary conditions involving additional perturbation parameters are imposed. Using two-scale asymptotic expansion method, we construct and justify the full asymptotic expansion for the solution to this problem.

Key Words: asymptotic expansion, homogenization, perforated domain.

$$B^{(m)} = \bigcup_{k=1}^{N_m} B_k^{(m)}, m = 1, 2, 3.$$

Let us introduce the following notations:

$$Q_0 := \square \setminus \overline{B}, \quad B^{(m)} := \bigcup_{z \in \mathbb{Z}^n} (z + B^{(m)}),$$

$$B_\varepsilon^{(m)} := \varepsilon B^{(m)} = \{x \in \mathbb{R}^n : \varepsilon^{-1}x \in B^{(m)}\},$$

$$m = 1, 2, 3,$$

where ε is a small parameter. Let Ω be a smooth bounded domain in $\mathbb{R}^n$. Define the following perforated domain $\Omega_\varepsilon = \Omega \setminus (\bigcup_{m=1}^3 B_\varepsilon^{(m)})$ and require the domain Ω_ε to be a domain with the Lipschitz boundary. Denote $\Gamma_\varepsilon = \partial\Omega \cap \overline{\Omega_\varepsilon}$ and $\Xi_\varepsilon^{(m)} = \Omega \cap \partial B_\varepsilon^{(m)}$, $m = 1, 2, 3$, $\Xi_\varepsilon = \bigcup_{m=1}^3 \Xi_\varepsilon^{(m)}$.

Let $a_{ij}(\xi)$, $\xi \in \mathbb{R}^n$, $i, j = \overline{1, n}$, be smooth

1-periodic functions such that

$$\begin{aligned} 1) \quad & \forall i, j = 1, \dots, n, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n: \quad a_{ij}(\xi) = a_{ji}(\xi), \\ 2) \quad & \exists \kappa_1 > 0 \quad \exists \kappa_2 > 0 \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n \quad \forall \eta \in \mathbb{R}^n: \\ & \kappa_1 |\eta|^2 \leq a_{ij}(\xi) \eta_i \eta_j \leq \kappa_2 |\eta|^2. \end{aligned} \quad (1)$$

Remark 1. Here and in the sequel we adopt the Einstein convention of summation over repeated indexes.

Let $f_0, g^{(1)}, g^{(2)} \in C_0^\infty(\Omega)$ be given functions. In Ω_ε we consider the following boundary-value problem

$$\begin{cases} -\partial_{x_i} (a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} u_\varepsilon(x)) + h u_\varepsilon = f_0, & x \in \Omega_\varepsilon \\ a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} u_\varepsilon(x) \nu_i = \varepsilon^\beta g^{(1)}, & x \in \Xi_\varepsilon^{(1)} \\ a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} u_\varepsilon(x) \nu_i = \varepsilon^\gamma g^{(2)}, & x \in \Xi_\varepsilon^{(2)} \\ u_\varepsilon = 0, & x \in \Xi_\varepsilon^{(3)} \\ u_\varepsilon = 0, & x \in \Gamma_\varepsilon \end{cases} \quad (2)$$

where h, β, γ are constants, $a_{ij}^\varepsilon(x) \equiv a_{ij}(\frac{x}{\varepsilon})$, $\partial_{x_i} u = \frac{\partial u}{\partial x_i}$, $(\nu_1(\frac{x}{\varepsilon}), \dots, \nu_n(\frac{x}{\varepsilon}))$ is the outward normal.

Recall that a function u_ε from the Sobolev space $H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon, \Xi_\varepsilon^{(3)}) = \{u \in H^1(\Omega_\varepsilon) : u|_{\Gamma_\varepsilon} = 0 \text{ and } u|_{\Xi_\varepsilon^{(3)}} = 0\}$ is a weak solution to problem (2) if the following integral identity

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_\varepsilon} a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} u_\varepsilon \partial_{x_i} v \, dx + h \int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon v \, dx \\ &= \varepsilon^\beta \int_{\Xi_\varepsilon^{(1)}} g^{(1)} v \, ds_x + \varepsilon^\gamma \int_{\Xi_\varepsilon^{(2)}} g^{(2)} v \, ds_x + \int_{\Omega_\varepsilon} f_0 v \, dx \end{aligned} \quad (3)$$

holds for any function $v \in H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon, \Xi_\varepsilon^{(3)})$.

2 Existence and uniqueness of the solution

Using Poincaré inequality we can establish the following inequality for every $v \in H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon, \Xi_\varepsilon^{(3)})$

$$\int_{\Omega_\varepsilon} v^2(x) \, dx \leq C_0 \varepsilon^2 \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla v(x)|^2 \, dx. \quad (4)$$

Then taking into account inequality [6]

$$\varepsilon \int_{\Xi_\varepsilon^{(m)}} v^2 \, ds_x \leq C_1 \left(\varepsilon^2 \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla v|^2 \, dx + \int_{\Omega_\varepsilon} v^2 \, dx \right),$$

$$\forall v \in H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon, \Xi_\varepsilon^{(3)}), \quad m = 1, 2$$

we deduce

$$\int_{\Xi_\varepsilon^{(m)}} v^2 \, ds_x \leq C_2 \varepsilon \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla v|^2 \, dx, \quad (5)$$

$$\forall v \in H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon, \Xi_\varepsilon^{(3)}), \quad m = 1, 2.$$

Remark 2. In what follows all constants C_i in inequalities are independent of the parameter ε .

Theorem 2.1. At each fixed value of ε problem (2) has exactly one solution $u_\varepsilon \in H^1(\Omega_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon, \Xi_\varepsilon^{(3)})$ for which the following estimate

$$\|u_\varepsilon\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)} \leq C_3 \left(\varepsilon \|f_0\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} + \varepsilon^{\beta+\frac{1}{2}} \|g^{(1)}\|_{L^2(\Xi_\varepsilon^{(1)})} + \varepsilon^{\gamma+\frac{1}{2}} \|g^{(2)}\|_{L^2(\Xi_\varepsilon^{(2)})} \right) \quad (6)$$

holds, where the constant C_3 is independent of ε and u_ε .

Proof. 1. Using standard approach in the theory of elliptic boundary-value problems, we prove the existence and uniqueness of the solutions to the problem (2).

2. Denote by u_ε the solution to problem (2). Set $v = u_\varepsilon$ in (3). Taking into account (1) and (4) we estimate the left-hand side of (3) as follows

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_\varepsilon} a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} u_\varepsilon \partial_{x_i} u_\varepsilon \, dx + h \int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2 \, dx \\ & \geq \frac{\kappa_1}{2} \int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|^2 \, dx + \left(\frac{\kappa_1}{2C_0\varepsilon^2} + h \right) \int_{\Omega_\varepsilon} u_\varepsilon^2 \, dx \\ & \geq C_4 \|u_\varepsilon\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)}^2, \end{aligned}$$

where $C_4 = \min(\frac{\kappa_1}{2}, \frac{\kappa_1}{2C_0\varepsilon^2} + h) \geq 0$ for sufficiently small $\varepsilon < \sqrt{\frac{\kappa_1}{2C_0|h|}}$.

Due to (5) we obtain

$$\varepsilon^\beta \int_{\Xi_\varepsilon^{(1)}} g^{(1)} u_\varepsilon \, ds_x$$

$$\begin{aligned} & \leq C_2 \varepsilon^\beta \|g^{(1)}\|_{L^2(\Xi_\varepsilon^{(1)})} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \left(\int_{\Omega_\varepsilon} |\nabla u_\varepsilon|^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \leq C_2 \varepsilon^{\beta+\frac{1}{2}} \|g^{(1)}\|_{L^2(\Xi_\varepsilon^{(1)})} \|u_\varepsilon\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)}, \end{aligned}$$

similarly

$$\varepsilon^\gamma \int_{\Xi_\varepsilon^{(2)}} g^{(2)} u_\varepsilon \, ds_x \leq C_2 \varepsilon^{\gamma+\frac{1}{2}} \|g^{(2)}\|_{L^2(\Xi_\varepsilon^{(2)})} \|u_\varepsilon\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)},$$

and taking into account (4)

$$\int_{\Omega_\varepsilon} f_0 u_\varepsilon \, dx \leq C_0 \varepsilon \|f_0\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} \|u_\varepsilon\|_{H^1(\Omega_\varepsilon)}$$

we obtain inequality (6).

3 Asymptotic expansion for the solution

We seek the main terms of the asymptotics for the solution u_ε in the form

$$u_\varepsilon(x, \xi) = \varepsilon^2 \mathcal{N}_0^{(1)}(\xi) f_0(x)$$

$$\begin{aligned} & + \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon^{2m+3} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-1} \mathcal{N}_\alpha^{(m+2-k)}(\xi) D^\alpha f_0(x) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^{2m+2} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-2} \mathcal{N}_\alpha^{(m+2-k)}(\xi) D^\alpha f_0(x) \\ & + \varepsilon^{\beta+1} \mathcal{K}_0^{(1)}(\xi) g^{(1)}(x) \\ & + \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon^{\beta+2m+2} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-1} \mathcal{K}_\alpha^{(m+2-k)}(\xi) D^\alpha g^{(1)}(x) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^{\beta+2m+1} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-2} \mathcal{K}_\alpha^{(m+2-k)}(\xi) D^\alpha g^{(1)}(x) \\ & + \varepsilon^{\gamma+1} \mathcal{M}_0^{(1)}(\xi) g^{(2)}(x) \\ & + \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon^{\gamma+2m+2} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-1} \mathcal{M}_\alpha^{(m+2-k)}(\xi) D^\alpha g^{(2)}(x) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \varepsilon^{\gamma+2m+1} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-2} \mathcal{M}_\alpha^{(m+2-k)}(\xi) D^\alpha g^{(2)}(x), \end{aligned} \quad (7)$$

where $\xi = \frac{x}{\varepsilon}$, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_k)$, $\alpha_j = 1, \dots, n$, $(\alpha) = k$, $D^\alpha = \frac{\partial^k}{\partial x_{\alpha_1} \dots \partial x_{\alpha_k}}$. Substituting the series (7) in (2) and collecting the terms of the same order ε both in the equation and in the boundary conditions, we obtain the recurrence set of the elliptic boundary-value problems for determination of $\mathcal{N}_\alpha^{(k)}(\xi)$, $\mathcal{K}_\alpha^{(k)}(\xi)$, $\mathcal{M}_\alpha^{(k)}(\xi)$

$$\begin{cases} -L_{\xi\xi}(\mathcal{N}_0^{(1)}) = 1 & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_0^{(1)}) = 0 & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_0^{(1)}) = 0 & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{N}_0^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \end{cases} \quad (8)$$

where $L_{\xi\xi}(\mathcal{N}_0^{(1)}) = \partial_{\xi_i} (a_{ij}(\xi) \partial_{\xi_j} \mathcal{N}_0^{(1)})$, $\sigma_\xi(\mathcal{N}_0^{(1)}) = a_{ij}(\xi) \partial_{\xi_j} \mathcal{N}_0^{(1)} \nu_i$, $(\nu_1, \dots, \nu_n)$ is the outward normal to S , $S = \bigcup_{m=1}^3 S^{(m)}$, $S^{(m)} = \partial B^{(m)}$, $m = 1, 2, 3$;

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{N}_0^{(p)}) = h \mathcal{N}_0^{(p-1)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_0^{(p)}) = 0 & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_0^{(p)}) = 0 & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{N}_0^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2 \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{N}_{\alpha_1}^{(1)}) = -T_{\alpha_1}(\mathcal{N}_0^{(1)}) & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1}^{(1)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi) \mathcal{N}_0^{(1)} \nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1}^{(1)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi) \mathcal{N}_0^{(1)} \nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{N}_{\alpha_1}^{(1)} = 0, & \text{on } S^{(3)}, \end{cases} \quad (10)$$

where

$$T_{\alpha_1}(\mathcal{N}_0^{(1)}) = a_{i\alpha_1}(\xi) \partial_{\xi_i} \mathcal{N}_0^{(1)} + \partial_{\xi_i} (a_{i\alpha_1}(\xi) \mathcal{N}_0^{(1)})$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{N}_{\alpha_1}^{(p)}) = h \mathcal{N}_{\alpha_1}^{(p-1)} - T_{\alpha_1}(\mathcal{N}_0^{(p)}) & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1}^{(p)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi) \mathcal{N}_0^{(p)} \nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1}^{(p)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi) \mathcal{N}_0^{(p)} \nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{N}_{\alpha_1}^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2 \end{cases} \quad (11)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -T_{\alpha_q}(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)}) \\ - a_{\alpha_{q-1} \alpha_q}(\xi) \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-2}}^{(1)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi) \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)} \nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi) \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)} \nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad q \geq 2 \end{cases} \quad (12)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = h \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p-1)} - T_{\alpha_q}(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)}) \\ - a_{\alpha_{q-1} \alpha_q}(\xi) \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-2}}^{(p)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi) \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)} \nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi) \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)} \nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{N}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2, \quad q \geq 2 \end{cases} \quad (13)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{K}_0^{(1)}) = 0 & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{K}_0^{(1)}) = 1 & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{K}_0^{(1)}) = 0 & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{K}_0^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \end{cases} \quad (14)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{K}_0^{(p)}) = h \mathcal{K}_0^{(p-1)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{K}_0^{(p)}) = 0 & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{K}_0^{(p)}) = 0 & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{K}_0^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2 \end{cases} \quad (15)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1}^{(1)}) = -T_{\alpha_1}(\mathcal{K}_0^{(1)}) & \text{in } Q_0, \\ \sigma_\xi(\mathcal{K}_{\alpha_1}^{(1)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi) \mathcal{K}_0^{(1)} \nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_\xi(\mathcal{K}_{\alpha_1}^{(1)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi) \mathcal{K}_0^{(1)} \nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{K}_{\alpha_1}^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \end{cases} \quad (16)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1}^{(p)}) = h\mathcal{K}_{\alpha_1}^{(p-1)} - T_{\alpha_1}(\mathcal{K}_0^{(p)}) & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1}^{(p)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi)\mathcal{K}_0^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1}^{(p)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi)\mathcal{K}_0^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{K}_{\alpha_1}^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2 \end{cases} \quad (17)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -T_{\alpha_q}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)}) \\ -a_{\alpha_{q-1}\alpha_q}(\xi)\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-2}}^{(1)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)}\nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)}\nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad q \geq 2 \end{cases} \quad (18)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = h\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p-1)} - T_{\alpha_1}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)}) \\ -a_{\alpha_{q-1}\alpha_q}(\xi)\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-2}}^{(p)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{K}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2, q \geq 2 \end{cases} \quad (19)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{M}_0^{(1)}) = 0 & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_0^{(1)}) = 0 & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_0^{(1)}) = 1 & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{M}_0^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \end{cases} \quad (20)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{M}_0^{(p)}) = h\mathcal{M}_0^{(p-1)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_0^{(p)}) = 0 & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_0^{(p)}) = 0 & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{M}_0^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2 \end{cases} \quad (21)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1}^{(1)}) = -T_{\alpha_1}(\mathcal{M}_0^{(1)}) & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1}^{(1)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi)\mathcal{M}_0^{(1)}\nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1}^{(1)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi)\mathcal{M}_0^{(1)}\nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{M}_{\alpha_1}^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \end{cases} \quad (22)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1}^{(p)}) = h\mathcal{M}_{\alpha_1}^{(p-1)} - T_{\alpha_1}(\mathcal{M}_0^{(p)}) & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1}^{(p)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi)\mathcal{M}_0^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1}^{(p)}) = -a_{i\alpha_1}(\xi)\mathcal{M}_0^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{M}_{\alpha_1}^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2 \end{cases} \quad (23)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -T_{\alpha_q}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)}) \\ -a_{\alpha_{q-1}\alpha_q}(\xi)\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-2}}^{(1)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)}\nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(1)}\nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(1)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad q \geq 2 \end{cases} \quad (24)$$

$$\begin{cases} L_{\xi\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = h\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p-1)} - T_{\alpha_q}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)}) \\ -a_{\alpha_{q-1}\alpha_q}(\xi)\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-2}}^{(p)} & \text{in } Q_0, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(1)}, \\ \sigma_{\xi}(\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)}) = -a_{i\alpha_q}(\xi)\mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_{q-1}}^{(p)}\nu_i & \text{on } S^{(2)}, \\ \mathcal{M}_{\alpha_1 \dots \alpha_q}^{(p)} = 0 & \text{on } S^{(3)}, \quad p \geq 2, q \geq 2 \end{cases} \quad (25)$$

The proof of existence and uniqueness of the solutions to the elliptic boundary-value problems (8)-(25) is standard.

For any $l \in \mathbb{N}$ consider the l^{th} partial sum of the series (7):

$$R_l^{\varepsilon}(x, \xi) := \varepsilon^2 \mathcal{N}_0^{(1)}(\xi) f_0(x)$$

$$+ \sum_{m=0}^l \varepsilon^{2m+3} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-1} \mathcal{N}_{\alpha}^{(m+2-k)}(\xi) D^{\alpha} f_0(x)$$

$$+ \sum_{m=1}^l \varepsilon^{2m+2} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-2} \mathcal{N}_{\alpha}^{(m+2-k)}(\xi) D^{\alpha} f_0(x)$$

$$+ \varepsilon^{\beta+1} \mathcal{K}_0^{(1)}(\xi) g^{(1)}(x)$$

$$+ \sum_{m=0}^l \varepsilon^{\beta+2m+2} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-1} \mathcal{K}_{\alpha}^{(m+2-k)}(\xi) D^{\alpha} g^{(1)}(x)$$

$$+ \sum_{m=1}^l \varepsilon^{\beta+2m+1} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-2} \mathcal{K}_{\alpha}^{(m+2-k)}(\xi) D^{\alpha} g^{(1)}(x)$$

$$+ \varepsilon^{\gamma+1} \mathcal{M}_0^{(1)}(\xi) g^{(2)}(x)$$

$$+ \sum_{m=0}^l \varepsilon^{\gamma+2m+2} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-1} \mathcal{M}_{\alpha}^{(m+2-k)}(\xi) D^{\alpha} g^{(2)}(x)$$

$$+ \sum_{m=1}^l \varepsilon^{\gamma+2m+1} \sum_{k=1}^{m+1} \sum_{(\alpha)=2k-2} \mathcal{M}_{\alpha}^{(m+2-k)}(\xi) D^{\alpha} g^{(2)}(x).$$

$$(26)$$

Denote $w_\varepsilon := u_\varepsilon - R_l^\varepsilon$ and find residuals of w_ε in problem (2):

$$\begin{cases} -\partial_{x_i} (a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} w_\varepsilon) + h w_\varepsilon \\ = \varepsilon^\delta F_0(x, \varepsilon) + \varepsilon^{\delta+1} \partial_{x_i} F_i(x, \varepsilon), & x \in \Omega_\varepsilon \\ a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} w_\varepsilon \nu_i = -\varepsilon^{\delta+1} F_i(x, \varepsilon) \nu_i, & x \in \Xi_\varepsilon^{(1)} \\ a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_j} w_\varepsilon \nu_i = -\varepsilon^{\delta+1} F_i(x, \varepsilon) \nu_i, & x \in \Xi_\varepsilon^{(2)} \\ w_\varepsilon = 0, & x \in \Xi_\varepsilon^{(3)} \\ w_\varepsilon = 0, & x \in \Gamma_\varepsilon \end{cases} \quad (27)$$

where $\delta := \min(2l+2, \beta+2l+1, \gamma+2l+1)$, $\sum_{i=0}^n \|F_i\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} \leq C_5$. Multiplying the equation of this problem by w_ε , integrating over Ω_ε , then integrating by parts we get

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_\varepsilon} a_{ij}^\varepsilon(x) \partial_{x_i} w_\varepsilon \partial_{x_j} w_\varepsilon dx + h \int_{\Omega_\varepsilon} w_\varepsilon^2 dx \\ & = \varepsilon^\delta \int_{\Omega_\varepsilon} F_0 w_\varepsilon dx - \varepsilon^{\delta+1} \int_{\Omega_\varepsilon} F_i \partial_{x_i} w_\varepsilon dx. \end{aligned}$$

Similarly as in Theorem 2.1, taking into account (1), (4) and estimations

$$\begin{aligned} \varepsilon^\delta \left| \int_{\Omega_\varepsilon} F_0 w_\varepsilon dx \right| & \leq C_6 \varepsilon^\delta \|w_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} \\ & \leq C_7 \varepsilon^{\delta+1} \|\nabla w_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)}, \end{aligned}$$

$$\varepsilon^{\delta+1} \left| \int_{\Omega_\varepsilon} F_i \partial_{x_i} w_\varepsilon dx \right| \leq C_8 \varepsilon^{\delta+1} \|\nabla w_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)}$$

we can proof the following results

Theorem 3.1. For any $l \geq \max(1, -\frac{\beta+1}{2}, -\frac{\gamma+1}{2})$, there exist positive constants C_9, ε_0 such that for all values $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$ the following estimates

$$\begin{aligned} \|\nabla u_\varepsilon - \nabla R_l^\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} & \leq C_9 \varepsilon^\delta, \\ \|u_\varepsilon - R_l^\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} & \leq C_9 \varepsilon^{\delta+1} \end{aligned} \quad (28)$$

hold.

Corollary 1. Additionally assume that $\beta > -1, \gamma > -1$. Then with the help of (4) and (28) we deduce from (28) that the following asymptotic estimates

$$\begin{aligned} \|\nabla u_\varepsilon - \nabla \bar{u}_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} & \leq C_{10} \varepsilon^{\min(2, \beta+1, \gamma+1)}, \\ \|u_\varepsilon - \bar{u}_\varepsilon\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} & \leq C_{10} \varepsilon^{1+\min(2, \beta+1, \gamma+1)} \end{aligned} \quad (29)$$

hold for sufficiently small ε . Here

$$\begin{aligned} \bar{u}_\varepsilon(x, \frac{x}{\varepsilon}) & := \varepsilon^2 \mathcal{N}_0^{(1)}(\frac{x}{\varepsilon}) f_0(x) \\ & + \varepsilon^{\beta+1} \mathcal{K}_0^{(1)}(\frac{x}{\varepsilon}) g^{(1)}(x) \\ & + \varepsilon^{\gamma+1} \mathcal{M}_0^{(1)}(\frac{x}{\varepsilon}) g^{(2)}(x). \end{aligned}$$

References

1. Cioranescu D., Donato P., Zaki R. Asymptotic behavior of elliptic problems in perforated domains with nonlinear boundary conditions // Asymptotic Analysis – 2007 – Vol 53 №4 – pp. 209-235
2. Chechkin G.A., Piatnitskii A.L., Shamaev A.S. Homogenization: Methods and Applications. Translations of Mathematical Monographs. - Providence: AMS, 2007. - Vol 234. - 234 p. (Translated from: Homogenization: Methods and Applications. - Novosibirsk: Tamara Rozhkovskaya Press, 2007. - 264 p.)
3. Marchenko V.A., Khruslov E.Ya., Homogenized models of micro-inhomogeneous medium. - Kyiv: Naukova Dumka, 2005. - 549 p. (in Russian).
4. Zhikov V.V., Kozlov S.M., Oleinik O.A. Homogenization of differential operators and integral functionals. - Berlin: Springer-Verlag, 1994. - 570 p.
5. Lions, J.-L. Asymptotic expansions in perforated media with a periodic structure // The Rocky Mountain Journal of Mathematics-1980-Vol 10 №1-pp.125-140
6. Mel'nyk T.A., Sivak O.A., Asymptotic analysis of a boundary-value problem with the nonlinear boundary multiphase interactions in a perforated domain // Ukrainian Mathematical Journal. - 2009. - Vol 61 №4 – pp. 494-512

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 517.984.48

В. Мольбога

Повнота системи кореневих векторів двочленних несамопряжених диференціальних операторів парного порядку з потенціалами, що є періодичними узагальненими функціями

В гільбертовому просторі $L^2(\mathbb{T})$ встановлюється повнота системи всіх кореневих векторів несамопряжених m -секторіальних операторів $S_{per}(V)$, породжених на колі $\mathbb{T}$ диференціальними виразами парного порядку з потенціалами, що є періодичними узагальненими функціями.

Ключові слова: несамопряжені оператори, системи кореневих векторів, повнота, сингулярне збурення.

E-mail: molyboga@math.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Овсієнко С.А.

The investigation is partially supported by DFFD of Ukraine under grant 28.1/017.

1. Introduction and main results

On the complex Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$, $\mathbb{T} := \mathbb{R}/2\mathbb{Z}$, we study the non-selfadjoint m -sectorial operators generated on a circle $\mathbb{T}$ by the two-terms differential expressions of an even order with periodic distribution potentials:

- $S_{per}(V)u \equiv S_{per}u := -D_{per}^{2m}u + V(x)u, \quad m \in \mathbb{N},$
- $D_{per}^{2m} := (-1)^m \frac{d^{2m}}{dx^{2m}}, \quad \text{Dom}(D_{per}^{2m}) = H^{2m}(\mathbb{T}),$
- $V(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \widehat{V}(k) e^{ikx} \in H^{-m}(\mathbb{T}),$
- $\text{Dom}(S_{per}(V)) = \{u \in H^m(\mathbb{T}) \mid S_{per}u \in L^2(\mathbb{T})\}.$

Here, by $H^s(\mathbb{T})$, $s \in \mathbb{R}$, we denote the Sobolev spaces of 2-periodic functions or distributions from the space $\mathcal{D}'_2 \equiv \mathcal{D}'_2(\mathbb{T})$ of 2-periodic generalized functions (for more details see [11, 4]) defined by means of their Fourier coefficients in the following

Volodymyr Molyboga

Completeness of the rootvector system of the two-terms non-selfadjoint differential operators of an even order with periodic distribution potentials

In the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$ we establish completeness of the system of all rootvectors of the non-selfadjoint m -sectorial operators $S_{per}(V)$ generated on a circle $\mathbb{T}$ by the two-terms differential expressions of an even order with periodic distribution potentials.

Key Words: non-selfadjoint operator, rootvector system, completeness, singular perturbation.

natural way:

$$H^s(\mathbb{T}) := \left\{ f = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \widehat{f}(k) e^{ikx} \mid \|f\|_{H^s(\mathbb{T})} < \infty \right\},$$

and

$$\|f\|_{H^s(\mathbb{T})} := \left(\sum_{k \in \mathbb{Z}} (1 + |k|)^{2s} |\widehat{f}(k)|^2 \right)^{1/2},$$

$$\widehat{f}(k) := \frac{1}{2} \langle f, e^{ikx} \rangle_{L^2(\mathbb{T})}, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

As known, see [7, 8, 9], the operators $S_{per}(V)$ are well defined on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$ as form sums [9, Theorem 1] or as the limits of operators with smooth 2-periodic potentials in a sense of the norm resolvent convergence [9, Theorem 3]. They are m -sectorial with respect to any angle containing the positive semiaxis, their spectra are discrete with single limiting point on the infinity, they are selfadjoint if and only if the potentials $V(x)$ are real-valued [9, Theorem 4].

Let us remind that an operator A on a Hilbert space is said to be m -sectorial if its numerical range $\Theta(A)$, i.e., the set

$$\Theta(A) := (Au, u), \quad u \in \text{Dom}(A), \quad \|u\| = 1,$$

is contained in a sector of the complex plane,

$$\Theta(A) \subset \text{Sect}(\gamma, \theta), \quad 0 \leq \theta < \frac{\pi}{2},$$

$$\text{Sect}(\gamma, \theta) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid |\arg(\lambda - \gamma)| \leq \theta\},$$

and the exterior of the sector $\text{Sect}(\gamma, \theta)$ belongs to the resolvent set $\text{Resolv}(A)$ of the operator A [6, Ch. V, §3.10].

The main purpose of the paper is to establish a completeness of the system of all rootvectors in the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$ of the operators $S_{per}(V)$. Notice that the case $m = 1$ was treated in the papers [12, 2].

Theorem 1. *The system of all rootvectors of the operator $S_{per}(V)$ is complete in the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$.*

Due to [9, Proposition 2] the resolvents $R(\lambda, S_{per}(V))$ of the operators $S_{per}(V)$ are compact. In the following Theorem 2 we prove a more strong assertion than the latter one which is a crucial point of the proof of Theorem 1.

Theorem 2. *The resolvents $R(\lambda, S_{per}(V))$ of the operators $S_{per}(V)$ are the Hilbert-Schmidt ones.*

More precisely,

$$R(\lambda, S_{per}(V)) \in \begin{cases} \mathfrak{S}_p, & p > 1, \quad \text{if } m = 1, \\ \mathfrak{S}_1 & \text{if } m = 2, 3, \dots \end{cases}$$

Here, by $\mathfrak{S}_p$, $1 \leq p \leq \infty$, we denote the von Neumann-Schatten ideals of compact operators on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$.

2. Preliminaries

Given a 2-periodic distribution

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{f}(k) e^{ik\pi x} \in \mathcal{D}'_2,$$

By the $\mathcal{D}'_2 \equiv \mathcal{D}'_2(\mathbb{T})$ we denote the space of 2-periodic generalized functions (distributions) on a circle $\mathbb{T}$ with the space $C_2^\infty \equiv C_2^\infty(\mathbb{T})$ of 2-periodic infinitely differentiable functions as a space of basic functions (for more details see [11, 4]).

By $(\cdot, \cdot)_{L^2(\mathbb{T})}$ we denote the inner product in the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$ defined as follows:

$$\begin{aligned} (u, v)_{L^2(\mathbb{T})} &:= \int_{\mathbb{T}} u(x) \overline{v(x)} dx \\ &= 2 \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{u}(k) \overline{\hat{v}(k)}, \quad u, v \in L^2(\mathbb{T}), \end{aligned}$$

where the Fourier coefficients defined in the following fashion:

$$\begin{aligned} \hat{u}(k) &:= \frac{1}{2} \left(u(x), e^{ik\pi x} \right)_{L^2(\mathbb{T})}, \\ \hat{v}(k) &:= \frac{1}{2} \left(v(x), e^{ik\pi x} \right)_{L^2(\mathbb{T})}, \quad k \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

By $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{T})}$ we denote the sesquilinear form pairing the spaces $\mathcal{D}'_2$ and C_2^∞ which is an extension by the continuity of the $L^2(\mathbb{T})$ -inner product:

$$(f, \varphi)_{L^2(\mathbb{T})} := 2 \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{f}(k) \overline{\hat{\varphi}(k)}, \quad f \in \mathcal{D}'_2, \varphi \in C_2^\infty,$$

and

$$\begin{aligned} \hat{f}(k) &:= \frac{1}{2} \left\langle f(x), e^{ik\pi x} \right\rangle_{L^2(\mathbb{T})}, \\ \hat{\varphi}(k) &:= \frac{1}{2} \left(\varphi(x), e^{ik\pi x} \right)_{L^2(\mathbb{T})}, \quad k \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

If the Fourier coefficients $\{\hat{f}(k)\}_{k \in \mathbb{Z}}$ of a distribution $f \in \mathcal{D}'_2$ satisfy the inequality

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} (1 + |k|)^{2s} |\hat{f}(k)|^2 < \infty$$

for some $s \in \mathbb{R}$ then we say that $f \in H^s(\mathbb{T})$. It is well known [1, 4] that

$$\mathcal{D}'_2(\mathbb{T}) = \bigcup_{s \geq 0} H^{-s}(\mathbb{T}), \quad C_2^\infty(\mathbb{T}) = \bigcap_{s \geq 0} H^s(\mathbb{T}).$$

For arbitrary $u, v \in \mathcal{D}'_2$ the product $u \cdot v$ we formally define in the following way:

$$(u \cdot v)(x) := \sum_{k, j \in \mathbb{Z}} \hat{u}(k - j) \hat{v}(j) e^{ik\pi x}.$$

The following known lemma [5, 10] gives sufficient conditions of existence of the product $u \cdot v$.

Lemma 3 (The Convolution Lemma). *Let given $s, r \geq 0$, and $t \in \mathbb{R}$ with $t < \min\{s, r\}$.*

(I) *If $s + r - t > 1/2$, then the product $u \cdot v$ regarded as the maps:*

$$\begin{aligned} H^r(\mathbb{T}) \times H^s(\mathbb{T}) &\rightarrow H^t(\mathbb{T}), \\ H^{-t}(\mathbb{T}) \times H^s(\mathbb{T}) &\rightarrow H^{-t}(\mathbb{T}), \end{aligned}$$

is continuous.

(II) For $s + t - l < 1/2$, this statement is not true.

The main point of this section is the following statement.

Proposition 4. Let the distributions $V(x)$ be in the Sobolev space $H^{-m}(\mathbb{T})$, and $\|V\|_{H^{-m}(\mathbb{T})} \leq R$ with $R > 0$. Set

$$\text{Ext}_M := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid |\text{Im} \lambda| \geq \text{Re} \lambda + M\}, \quad M \geq 1.$$

Then there exists such $M = M(m, R) \geq 1$ that the set Ext_M belongs to the all resolvent sets $\text{Resolv}(S_{\text{per}}(V))$ of the operators $S_{\text{per}}(V)$ with $V(x) \in H^{-m}(\mathbb{T})$ and $\|V\|_{H^{-m}(\mathbb{T})} \leq R$, and for $\lambda \in \text{Ext}_M$ the resolvents $R(\lambda, S_{\text{per}}(V))$ have the representations

$$\begin{aligned} R(\lambda) &= R(\lambda, S_{\text{per}}(V)) = U_\lambda |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} \\ &= (\text{Id} - |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} U_\lambda)^{-1} \\ &\quad |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (1)$$

Here, the operators U_λ and $|\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}}$ are defined from the polar decomposition

$$(\lambda - D_{\text{per}}^{2m})^{-1} = U_\lambda |(\lambda - D_{\text{per}}^{2m})^{-1}|,$$

and by $V := V(x)$ we denote the multiplication operator on the distribution $V(x)$.

Proof of Proposition 4. At first, we find matrix representations of operators which are the parts of the representations (1) of the resolvents $R(\lambda, S_{\text{per}}(V))$.

Let A be an operator on the space D'_2 . Then formally its matrix representation is defined as follows:

$$A = \{A(k, j)\}_{k, j \in \mathbb{Z}},$$

$$A(k, j) = \frac{1}{2} \langle A e^{ij\pi x}, e^{ik\pi x} \rangle_{L^2(\mathbb{T})}, \quad k, j \in \mathbb{Z}.$$

Now, for the operators D_{per}^{2m} , $V = V(x)$ and $(\lambda - D_{\text{per}}^{2m})^{-1}$ we have (with $\lambda \in \text{Ext}_M$):

$$\begin{aligned} D_{\text{per}}^{2m}(k, j) &= \frac{1}{2} \langle D_{\text{per}}^{2m} e^{ij\pi x}, e^{ik\pi x} \rangle_{L^2(\mathbb{T})} \\ &= k^{2m} \pi^{2m} \delta_{kj}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V(k, j) &= \frac{1}{2} \langle V(x) e^{ij\pi x}, e^{ik\pi x} \rangle_{L^2(\mathbb{T})} \\ &= \widehat{V}(k - j). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\lambda - D_{\text{per}}^{2m})(k, j) &= \frac{1}{2} \langle (\lambda - D_{\text{per}}^{2m}) e^{ij\pi x}, e^{ik\pi x} \rangle_{L^2(\mathbb{T})} \\ &= (\lambda - k^{2m} \pi^{2m}) \delta_{kj}. \end{aligned}$$

$$(\lambda - D_{\text{per}}^{2m})^{-1}(k, j) = \frac{1}{\lambda - k^{2m} \pi^{2m}} \delta_{kj}.$$

Further, set

$$A(\lambda, V(x)) \equiv A_\lambda := |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}}.$$

Slightly more complicative computations give the following representations:

$$\begin{aligned} |(\lambda - D_{\text{per}}^{2m})^{-1}|(k, j) &= |(\lambda - D_{\text{per}}^{2m})|^{-1}(k, j) \\ &= \frac{1}{|\lambda - k^{2m} \pi^{2m}|} \delta_{kj}, \\ |(\lambda - D_{\text{per}}^{2m})|^{-\frac{1}{2}}(k, j) &= \frac{1}{|\lambda - k^{2m} \pi^{2m}|^{\frac{1}{2}}} \delta_{kj}, \\ U_\lambda(k, j) &= \frac{|\lambda - k^{2m} \pi^{2m}|}{|\lambda - j^{2m} \pi^{2m}|} \delta_{kj}, \end{aligned}$$

and

$$A_\lambda(k, j) = \frac{\widehat{V}(k - j)}{|\lambda - k^{2m} \pi^{2m}|^{\frac{1}{2}} |\lambda - j^{2m} \pi^{2m}|^{\frac{1}{2}}}.$$

Lemma 5. Let the distributions $V(x)$ be in the Sobolev space $H^{-m}(\mathbb{T})$, and $\|V\|_{H^{-m}(\mathbb{T})} \leq R$ with $R > 0$. The operators

$$A_\lambda = |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{\text{per}}^{2m}|^{-\frac{1}{2}}$$

are the Hilbert-Schmidt ones on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$, and for $\lambda \in \text{Ext}_M$, $M \geq 1$, the following estimates are fulfilled:

$$\|A_\lambda\|_{HS} \leq \frac{2^{2m+1} \|V\|_{H^{-m}(\mathbb{T})}}{M^{1/4}} \leq \frac{2^{2m+1} R}{M^{1/4}}.$$

Here, by the $\|\cdot\|_{HS}$ we denote the Hilbert-Schmidt norm of an operator.

Proof. Let $\lambda \in \text{Ext}_M$, $M \geq 1$. Then we have (with $\langle k \rangle := 1 + |k|$):

$$\begin{aligned} \|A_\lambda\|_{HS}^2 &= \sum_{k, j \in \mathbb{Z}} \frac{|\widehat{V}(k - j)|^2}{|\lambda - k^{2m} \pi^{2m}| |\lambda - j^{2m} \pi^{2m}|} \\ &\leq \sum_{k, j \in \mathbb{Z}} \frac{\langle k - j \rangle^{-2m} |\widehat{V}(k - j)|^2 \langle k - j \rangle^{2m}}{|\lambda - k^{2m} \pi^{2m}| |\lambda - j^{2m} \pi^{2m}|}. \end{aligned}$$

Applying estimates of Lemma 6 we get need result,

$$\begin{aligned} \|A_\lambda\|_{HS}^2 &\leq 2 \sum_{k, j \in \mathbb{Z}} \frac{\langle k - j \rangle^{-2m} |\widehat{V}(k - j)|^2 \langle k - j \rangle^{2m}}{|\lambda|^{1/4} |k^{2m} \pi^{2m}| |\lambda|^{1/4} |j^{2m} \pi^{2m}|} \end{aligned}$$

and further

$$\begin{aligned} \|A_\lambda\|_{HS}^2 &\stackrel{L_6(d)}{\leq} 2^{2m+1} \cdot \sum_{k, j \in \mathbb{Z}} \frac{\langle k-j \rangle^{-2m} |\widehat{V}(k-j)|^2 (\langle k \rangle^{2m} + \langle j \rangle^{2m})}{|M + k^{2m} \pi^{2m}| |M + j^{2m} \pi^{2m}|} \\ &= 2^{2m+2} \sum_{k, j \in \mathbb{Z}} \frac{\langle k-j \rangle^{-2m} |\widehat{V}(k-j)|^2 \langle k \rangle^{2m}}{|M + k^{2m} \pi^{2m}| |M + j^{2m} \pi^{2m}|} \\ &\leq 2^{2m+2} \sup_{k \in \mathbb{Z}} \frac{\langle k \rangle^{2m}}{|M + k^{2m} \pi^{2m}|} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \frac{1}{|M + j^{2m} \pi^{2m}|} \cdot \sum_{k \in \mathbb{Z}} \langle k-j \rangle^{-2m} |\widehat{V}(k-j)|^2 \\ &\stackrel{L_6(b), (c)}{\leq} 2^{2m+2} \cdot 2^{2m} \cdot \frac{1}{\sqrt{M}} \cdot \|V\|_{H^{-m}(\mathbb{T})}^2 \\ &= \frac{2^{4m+2} \|V\|_{H^{-m}(\mathbb{T})}^2}{\sqrt{M}} \leq \frac{2^{4m+2} R^2}{\sqrt{M}}. \end{aligned}$$

So, finally we have got

$$\|A_\lambda\|_{HS} \leq \frac{2^{2m+1} \|V\|_{H^{-m}(\mathbb{T})}}{M^{1/4}} \leq \frac{2^{2m+1} R}{M^{1/4}}.$$

The proof of Lemma 5 is complete. $\square$

Now, all preparations are made and we are ready to prove the representations (1) of the resolvents $R(\lambda, S_{per}(V))$.

Set

$$\begin{aligned} K(\lambda, V(x)) &\equiv K_\lambda \\ &= (\text{Id} - |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} U_\lambda)^{-1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Then the operators $K(\lambda, V(x))$ are well defined on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$ if only

$$\text{spr } |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} U_\lambda < 1.$$

We have

$$\begin{aligned} \text{spr } |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} U_\lambda &\leq \left\| |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} U_\lambda \right\| \\ &\leq \left\| |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} \right\| \\ &\leq \|A(\lambda, V(x))\|_{HS}. \end{aligned}$$

By virtue of Lemma 5 we can choose $M = M(m, R) \geq 1$ in a such way so that the inequalities

$$\text{spr } K_\lambda \leq \|A_\lambda\|_{HS} \leq \frac{2^{2m+1} R}{M^{1/4}} \leq \frac{1}{4} \quad (3)$$

hold. Set

$$M := (2^{2m+3} R)^4.$$

Then the (3) hold, and we conclude that the operators $K(\lambda, V(x))$ are well defined on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$.

Let $\lambda \in \text{Ext}_M$, and $M = (2^{2m+3} R)^4$. Set

$$\begin{aligned} T(\lambda, V(x)) &\equiv T_\lambda \\ &:= U_\lambda |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} K(\lambda, V(x)) |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Due to the above considerations the operators $T(\lambda, V(x))$ are well defined on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$.

Our main goal now is to prove that

$$R(\lambda, S_{per}(V)) \equiv T(\lambda, V(x))$$

for $\lambda \in \text{Ext}_M$, and $M \geq (2^{2m+3} R)^4$.

Let $\{V_n(x)\}_{n \in \mathbb{N}}$ be a sequence of 2-periodic infinitely differentiable functions which converge to the distribution $V(x)$ in the Sobolev space $H^{-m}(\mathbb{T})$,

$$V_n(x) \xrightarrow{H^{-m}(\mathbb{T})} V(x) \quad \text{as } n \rightarrow \infty.$$

Then for sufficiently large n we have

$$\|V_n(x)\|_{H^{-m}(\mathbb{T})} \leq 2R, \quad n \geq n_0(R).$$

So, for $M = (2^{2m+3} R)^4$ we get

$$\begin{aligned} \text{spr } |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} V_n |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} U_\lambda &\leq \|A(\lambda, V_n(x))\|_{HS} \leq \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

and hence the operators

$$\begin{aligned} T(\lambda, V_n(x)) &= U_\lambda |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} K(\lambda, V_n(x)) \\ &\quad \cdot |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

are well defined on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$.

Further,

$$\begin{aligned} T(\lambda, V(x)) - T(\lambda, V_n(x)) &= U_\lambda |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot (K(\lambda, V(x)) - K(\lambda, V_n(x))) |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} \\ &= U_\lambda |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} K(\lambda, V(x)) |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot (V - V_n) |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} U_\lambda \\ &\quad \cdot K(\lambda, V_n(x)) |\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Thus for $\lambda \in \text{Ext}_M$ with $M = (2^{2m+3} R)^4$ we get

$$\begin{aligned} \|T(\lambda, V(x)) - T(\lambda, V_n(x))\| &\leq \text{Const} \cdot \|\lambda - D_{per}^{2m}\|^{-\frac{1}{2}} (V - V_n) \|\lambda - D_{per}^{2m}\|^{-\frac{1}{2}} \\ &\leq \text{Const} \cdot \|A(\lambda, V(x) - V_n(x))\|_{HS} \\ &\leq \text{Const} \cdot \|V(x) - V_n(x)\|_{H^{-m}(\mathbb{T})}, \end{aligned}$$

i.e.,

$$T(\lambda, V_n(x)) \equiv T(\lambda, V(x)), \quad n \rightarrow \infty. \quad (A)$$

On the other hand, due to [9, Theorem 5]

$$R(\lambda, S_{per}(V_n)) \Rightarrow R(\lambda, S_{per}(V)), \quad n \rightarrow \infty. \quad (B)$$

But for $V_n(x) \in L^2(\mathbb{T})$ with $n \geq n_0(R)$ it is easy to see that

$$R(\lambda, S_{per}(V_n)) \equiv T(\lambda, V_n(x)). \quad (4)$$

So, taking into account [9, Theorem 4(a)] we conclude that there exists such $M = M(m, R) \geq 1$ that

$$\text{Ext}_M \subseteq \text{Resolv}(S_{per}(V)),$$

and for sufficiently large n

$$\text{Ext}_M \subseteq \text{Resolv}(S_{per}(V_n)), \quad n \geq n_0(R).$$

Further, applying (A), (B) and (4) we finally have got the need result

$$R(\lambda, S_{per}(V)) \equiv T(\lambda, V(x))$$

for $\lambda \in \text{Ext}_M$, $M \geq (2^{2m+3}R)^4$.

The proof of Proposition 4 is complete. $\square$

3. Proofs of the main theorems

In this section we will prove Theorem 1 and Theorem 2.

3.1. Proof of Theorem 2. Due to Proposition 4 there exists such number $M \geq 1$ that

$$\text{Ext}_M \subseteq \text{Resolv}(S_{per}(V)),$$

and for $\lambda \in \text{Ext}_M$ the resolvents $R(\lambda, S_{per}(V))$ have the representations (1).

Taking into account that

$$|\lambda - D_{per}^{2m}|^{-\frac{1}{2}} \in \begin{cases} \mathfrak{S}_p, & p > 1, & \text{if } m = 1, \\ \mathfrak{S}_1 & & \text{if } m = 2, 3, \dots \end{cases}$$

and also that the operators (2) are bounded, and that the $\mathfrak{S}_p$, $p \in [1, \infty)$, are the symmetric norm ideals of the ring $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{T}))$ of the bounded operators on the Hilbert space $L^2(\mathbb{T})$, we derive

$$R(\lambda, S_{per}(V)) \in \begin{cases} \mathfrak{S}_p, & p > 1, & \text{if } m = 1, \\ \mathfrak{S}_1 & & \text{if } m = 2, 3, \dots \end{cases} \quad (5)$$

for $\lambda \in \text{Ext}_M$ with some $M \geq 1$.

Now, applying the Hilbert identity:

$$R(\mu) = R(\lambda) + (\mu - \lambda)R(\mu)R(\lambda),$$

$$\mu \in \text{Resolv}(S_{per}(V)), \quad \lambda \in \text{Ext}_M,$$

and taking into account that $\mathfrak{S}_p$, $p \in [1, \infty)$, are symmetric norm ideals we obtain necessary result:

$$R(\lambda, S_{per}(V)) \in \begin{cases} \mathfrak{S}_p, & p > 1, & \text{if } m = 1, \\ \mathfrak{S}_1 & & \text{if } m = 2, 3, \dots \end{cases}$$

$$\lambda \in \text{Resolv}(S_{per}(V)).$$

The proof of Theorem 2 is complete.

3.2. Proof of Theorem 1. Taking into account that the eigenvalues of the operators $S_{per}(V)$ are the characteristic numbers of their resolvents $R(\lambda, S_{per}(V))$ (w.l.o.g. we may assume that $\text{Re}(S_{per}(V)u, u) > 0$), and also that the rootvectors of these operators coincide, to prove Theorem 1 it suffices to apply [3, Theorem 6.1], [9, Theorem 4(a)] and Theorem 2.

Appendix: Some estimates

Here, we give the auxiliary estimates which we use during the proving of Proposition 4.

Lemma 6. Let $m \in \mathbb{N}$, and let $\lambda \in \text{Ext}_M$ with $M \geq 1$. Then the following estimates are fulfilled ($k \in \mathbb{Z}$, $a, b \in \mathbb{R}$):

$$(a) \quad |\lambda - k^{2m}\pi^{2m}| \geq \sin \frac{\pi}{4} (M + k^{2m}\pi^{2m}).$$

$$(b) \quad \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{1}{M + k^{2m}\pi^{2m}} \leq \frac{1}{M^{1/2}}.$$

$$(c) \quad \sup_{k \in \mathbb{Z}} \frac{(1 + |k|)^{2m}}{M + k^{2m}\pi^{2m}} \leq 2^{2m},$$

$$(d) \quad (|a| + |b|)^m \leq 2^m(|a|^m + |b|^m).$$

Proof. The estimates (a) follow from the enough evident geometric considerations.

Let prove the the estimate (b). We have

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{1}{M + k^{2m}\pi^{2m}} &\leq 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{M + k^{2m}\pi^{2m}} \\ &\leq 2 \int_0^{\infty} \frac{dx}{M + x^{2m}\pi^{2m}} = \frac{2}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\frac{M}{\pi^2} + x^2} \\ &= \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{\pi}{\sqrt{M}} \arctan \frac{x\pi}{\sqrt{M}} \right) \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{\sqrt{M}}. \end{aligned}$$

The proof of the estimate (b) is complete.

Now, let prove the the estimate (c). We have

$$\sup_{k \in \mathbb{Z}} \frac{(1 + |k|)^{2m}}{M + k^{2m} \pi^{2m}} \leq \sup_{k \in \mathbb{Z}} \frac{(1 + |k|)^{2m}}{1 + k^{2m} \pi^{2m}}.$$

Set

$$f(x) := \frac{(1 + x)^{2m}}{1 + x^{2m} \pi^{2m}}, \quad x \in [0, \infty).$$

Then

$$f'(x) = \frac{2m(1 + x)^{2m-1} (1 - x^{2m-1} \pi^{2m})}{(1 + x^{2m} \pi^{2m})^2}.$$

Hence,

$$f'(x_0) = 0 \quad \text{for} \quad x_0 = \left(\frac{1}{\pi^{2m}} \right)^{\frac{1}{2m-1}},$$

and

$$\begin{aligned} f'(x) &> 0 \quad \text{if} \quad x \in [0, x_0), \\ f'(x) &< 0 \quad \text{if} \quad x \in [x_0, \infty). \end{aligned}$$

Thus, we conclude that in the point x_0 the function $f(x)$ has a maximum.

Further,

$$\begin{aligned} f(0) &= 1, \quad f(\infty) = \frac{1}{\pi^{2m}}, \\ f(x_0) &= \frac{(1 + x_0)^{2m}}{1 + x_0^{2m} \pi^{2m}} \leq 2^{2m}. \end{aligned}$$

So,

$$\sup_{k \in \mathbb{Z}} \frac{(1 + |k|)^{2m}}{M + k^{2m} \pi^{2m}} \leq \sup_{x \in [0, \infty)} f(x) \leq 2^{2m}.$$

The proof of the estimate (c) is complete.

Let prove (d). For any $a, b \in \mathbb{R}$ we have

$$|a| + |b| \leq 2 \max\{|a|, |b|\}.$$

And therefore,

$$(|a| + |b|)^m \leq 2^m \max^m\{|a|, |b|\} \leq 2^m(|a|^m + |b|^m).$$

The proof of the estimate (d) is complete. $\square$

References

1. Berezausky, Yu., *Expansions in eigenfunctions of self-adjoint operators*, Providence, RI, AMS Transl. Vol. 17, 1968, 809 pp.; Russian edition: Naukova Dumka, Kiev, 1965, 800 pp.
2. Djakov, P., Mitvagin, B., *Bari-Murkus property for Riesz projections of Hill operators with singular potentials*, Functional analysis and complex analysis, 59–80. Contemp. Math., ISI, AMS, Providence, RI, 2009.
3. Golberg, I., Krein, M., *Introduction to the theory of linear non-selfadjoint operators*, vol. 18 (Transl. of Math. Monographs), Providence, RI, AMS, 1969; Russian edition: Nauka, Moscow, 1965, 448 pp.
4. Gorbachuk, V.I., Gorbachuk, M.L., *Boundary value problems for operator differential equations*, Kluwer, Dordrecht, etc., 1991, 347 pp.; Russian edition: Naukova Dumka, Kiev, 1984, 283 pp.
5. Kappeler, T., Möhr, C., *Estimates for periodic and Dirichlet eigenvalues of the Schrödinger operator with singular potentials*, J. Funct. Anal. **186** (2001), 62–91.
6. Kato, T., *Perturbation theory for linear operators*, Springer-Verlag, Berlin, etc., 1966, 592 pp.; Russian edition: Mir, Moscow, 1972, 740 pp.
7. Mikhailets, V., Molyboga, V., *The spectral problems over the periodic classes of distributions*, Preprint, Institute of Mathematics of NAS of Ukraine, Kyiv, 2004, 46 p. (Ukrainian)
8. Mikhailets, V., Molyboga, V., *The perturbation of periodic and semiperiodic operators by Schwartz distributions*, Reports of NAS of Ukraine (2006), no. 7, 26–31. (Russian)
9. Mikhailets, V., Molyboga, V., *Singularly perturbed periodic and semiperiodic differential operators*, Ukrainian Math. J. **59** (2007), no. 6, 785–797.
10. Möhr, C., *Schrödinger operators with singular potentials on the circle: spectral analysis and applications*, Thesis at the University of Zürich, 2001, 134 pp.
11. Vladimirov, V., *Generalized functions in mathematical physics*, Nauka, Moscow, 1976, 280 pp. (Russian)
12. Savchuk, A., Shkalikov, A., *Sturm-Liouville operators with distribution potentials*, Tr. Mosk. Mat. Obs. **64** (2003), 159–212. (Russian); translation in Trans. Math. Soc. (2003), 143–192.

Received 30.04.2010

УДК 512.54

А.С. Олійник, докторант

Двостанові автоморфізми корневих дерев та вільні добутки скінченних груп

Показано, що вільний добуток скінченного числа скінченних груп породжується двостановими автоморфізмами деякого кореневого дерева.

Ключові слова: кореневе дерево, група автоморфізмів, стан, вільний добуток.

A.S. Oliynyk, researcher working on habilitation

Two-state automorphisms of rooted trees and free products of finite groups

It is shown that the free product of finite number of finite groups is generated by two-state automorphisms of some rooted tree.

Key Words: rooted tree, automorphism group, state, free product.

E-mail: olijnyk@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

The automorphism group of an infinite regular rooted tree is rich of free subgroups ([1]). But finding concrete examples of such subgroups, especially generated by finite state automorphisms, is a challenging task. One way to give such examples is to construct a faithful action of the free product of some finite groups on a rooted tree and then to choose therein some free subgroup. Note the following examples of free products generated by finite state automorphisms. The free product of n ($n \geq 3$) cyclic groups of order 2 over binary tree presented by the author ([2]). The free product of infinite number of cyclic groups of order 2 over binary tree established by M. Brunner and S. Sidki ([3]). The free product of finite number of cyclic groups of order 2 over binary tree, generated by an automaton (i.e. an example of self-similar action), constructed by D. Savchuk and Y. Vorobets [4]. In this note it is proved that the free product of finite number of arbitrary finite groups is generated by automorphisms with exactly two states of some regular rooted tree.

2 Automorphisms of rooted trees

Let n be an integer, $n \geq 2$. By T_n it is denoted a rooted regular tree of degree n (it means that its root has degree n and all other vertices $n+1$). The rooted subtree, rooted at arbitrary vertex of T_n is isomorphic to the whole tree. For each vertex let us fix some isomorphism and enumerate vertices

connected to the root. Denote by $\text{Aut } T_n$ the automorphism group of T_n . This group splits into the permutational wreath product of the symmetric group S_n of degree n and itself ([5]), i.e.

$$\text{Aut } T_n \simeq S_n \wr \text{Aut } T_n = S_n \ltimes (\text{Aut } T_n)^n.$$

This means that each automorphism $g \in \text{Aut } T_n$ is uniquely representable as $(g_1, \dots, g_n)\sigma$, where $g_1, \dots, g_n \in \text{Aut } T_n$ and $\sigma \in S_n$. The automorphisms $g_1, \dots, g_n$ act on rooted subtrees whose roots connected with the root of T_n and the permutation σ permutes these subtrees. We refer to automorphisms $g_1, g_2, \dots, g_n$ as to states (or sections, projections) of the first level of g and to σ as to rooted permutation of g . By states of the second level of g we mean states of the first level of $g_1, g_2, \dots, g_n$. Inductively we define states of the k -th level of g for every natural k . The state of the 0-th level of g is g itself. Therefore, for each vertex v of the tree T_n the state g_v of g at this vertex is defined. The rooted permutation of this state is called the permutation at the vertex v of g . An automorphism $g \in \text{Aut } T_n$ is called finite state automorphism if g has only finite number of different states. All finite state automorphisms form a subgroups FA_n in $\text{Aut } T_n$. Subgroups of FA_n are called finitely automatic.

Denote by e the identity transformation. Note, that we use the right action of transformations. In particular, for automorphisms $g = (g_1, \dots, g_n)\sigma$ and $h = (h_1, \dots, h_n)\tau$ one obtain

their product $g \cdot h$ as

$$(g_1 h_1 \sigma, \dots, g_n h_n \sigma) \sigma \tau.$$

More generally, for arbitrary vertex $v \in T_n$ and corresponding states g_v, h_v the state of their product $(g \cdot h)_v$ can be expressed as $g_v \cdot h_{v\sigma}$.

3 Main result

Theorem 3.1. *Let $G_1, \dots, G_m$ be some finite groups, $m \geq 2$. Then for sufficiently large n the group $\text{Aut } T_n$ contains a subgroup, generated by automorphisms with exactly 2 states, that isomorphic to the free product $G_1 * \dots * G_m$.*

Proof. For a suitable n we define explicitly a subgroup of $\text{Aut } T_n$, generated by two-states automorphisms, that admits a factorization required.

Let the orders of groups $G_1, \dots, G_m$ are equal $n_1, \dots, n_m$ correspondingly. For each group G_i consider a set X_i of cardinality n_i , $1 \leq i \leq m$. Suppose additionally that

$$|X_i \cap X_j| = 1, i \neq j, \text{ and } \bigcap_{i=1}^m X_i = 1,$$

i.e. each two sets intersects on the unique, common for all sets, element. Denote this element by ϵ . Let $X = \bigcup_{i=1}^m X_i$ and $n = |X|$. Then

$$n = n_1 + \dots + n_m - m + 1.$$

The set X is the set of indices.

For each i , $1 \leq i \leq m$, fix a (right) regular action ρ_i of the group G_i on the set X_i . Extend this action trivially on the set X . For an element $g \in G_i$ denote by π_g the corresponding permutation of X . For $x \in X$ we get

$$x^{\pi_g} = \begin{cases} x^{\rho_i(g)} & \text{if } x \in X_i \\ x & \text{otherwise} \end{cases}.$$

Consider a rooted tree T_n and use X to enumerate its vertices connected to the root. As for each vertex of T_n an isomorphism between T_n and the rooted subtree rooted at this vertex is fixed one can label each vertex of T_n by a finite sequence of elements from X . For each element $g \in G_i$, $1 \leq i \leq m$, let us define two automorphisms a_g and b_g of the tree T_n . We put

$$a_g = (c_{g,x}, x \in X) \pi_g, \quad b_g = (c_{g,x}, x \in X) e,$$

where

$$c_{g,x} = \begin{cases} a_g & \text{if } x \in X \setminus X_i \\ b_g & \text{if } x \in X_i \end{cases}.$$

Automorphisms a_g and b_g have exactly 2 states, a_g and b_g , and differ only by their rooted permutations. This definition is correct. Note, that for the identity element e , taken from arbitrary group G_i , both automorphisms a_e and b_e are equal to the identity automorphism e of T_n . For different nontrivial $g, h \in \bigcup_{i=1}^m G_i$ elements in both pairs a_g, a_h and b_g, b_h are different and nontrivial for their rooted permutations are different and nontrivial.

Denote by A (correspondingly, by B) the subgroup of $\text{Aut } T_n$, generated by all elements a_g (correspondingly, b_g), where $g \in G_i$, $1 \leq i \leq m$. Then these two groups are isomorphic to the free product $G_1 * \dots * G_m$. To complete the proof of the theorem, let us show that A admits such a factorization. For B the proof is the same.

Firstly, for each i , $1 \leq i \leq m$, the group A_i , generated by elements a_g , $g \in G_i$, is isomorphic to G_i . In fact, A_i consists of these elements and the rule $g \mapsto a_g$ is an isomorphism. Indeed, for arbitrary $g, h \in G_i$ we obtain

$$\begin{aligned} a_g \cdot a_h &= \\ &= (c_{g,x} \cdot c_{h,x^{\pi_g}}, x \in X) \pi_g \pi_h = \\ &= (c_{g,x} \cdot c_{h,x}, x \in X) \pi_{gh} \end{aligned}$$

as X_i is invariant under π_g and the value of the state $c_{h,x}$, $x \in X$, depends only on the condition $x \in X_i$ or not. Then for each $x \in X$ the state $c_{g,x} \cdot c_{h,x}$ equals to $a_g \cdot a_h$ or $b_g \cdot b_h$. Obviously we have

$$b_g \cdot b_h = (c_{g,x} c_{h,x}, x \in X).$$

This means that the rooted permutation of the product $a_g \cdot a_h$ is equal to the one of a_{gh} . The same is true for their corresponding states of the first level, and so on. Hence, $a_g \cdot a_h = a_{gh}$.

Secondly, we show, that the group A splits into the free product $A_1 * \dots * A_m$. It is enough to show, that for arbitrary $k \geq 1$, indices $i_1, \dots, i_k \in \{1, \dots, m\}$ such that $i_j \neq i_{j+1}$ ($1 \leq j \leq k-1$) and nontrivial elements $g_1 \in G_{i_1}, \dots, g_k \in G_{i_k}$ the product $a_{g_1} \cdot \dots \cdot a_{g_k}$ is a nontrivial automorphism of the tree T_n . Denote by v_k the vertex of T_n labelled by $\underbrace{\epsilon \dots \epsilon}_k$ and let v_0 be the root of T_n . We

prove by induction on k the following statement about permutations at these vertices of the product $a_{g_1} \cdot \dots \cdot a_{g_k}$. The permutation at the vertex

v_{k-1} equals π_{g_k} and therefore nontrivial while the permutations at vertices v_l , $l \geq k$, are trivial. The case $k = 1$ is easily verified by the definition of a_{g_1} . Let the statement is proved for $k - 1$. Consider the permutation at the vertex v_l , $l \geq k - 1$ of $a_{g_1} \cdot \dots \cdot a_{g_k}$. It equals to the product of the permutation at v_l of $a_{g_1} \cdot \dots \cdot a_{g_{k-1}}$ which is trivial by the assumption of induction and the permutation at $v_l^{a_{g_1} \cdot \dots \cdot a_{g_{k-1}}}$ of a_{g_k} and hence equals to the second multiplier. The last one equals to the rooted permutation of the state c_{g_k, ϵ^τ} of a_{g_k} , where τ is the permutation at v_{l-1} of $a_{g_1} \cdot \dots \cdot a_{g_{k-1}}$. If $l = k - 1$ then by inductive hypothesis $\tau = \pi(g_{k-1})$ and the required permutation equals to the rooted permutation of the state $c_{g_k, \epsilon^{\pi(g_{k-1})}}$ of a_{g_k} . Since $i_{k-1} \neq i_k$ then $\epsilon^{\pi(g_{k-1})} \notin X_{i_k}$ and the latter permutation equals π_{g_k} . By the assumption of induction if $l > k - 1$ then τ is trivial and $c_{g_k, \epsilon^\tau} = c_{g_k, \epsilon}$. This means that the permutation at the vertex v_l of $a_{g_1} \cdot \dots \cdot a_{g_k}$ is trivial. This finishes the inductive step and therefore completes the proof of the theorem. $\square$

4 Concluding remarks

To prove that constructed group A (or B) admits a factorization as a free product one may also use generalized ping-pong lemma (see, for example, [7]). That proof uses the action of A on the boundary of T_n .

Subgroups of T_n , $n \geq 3$ generated by two-state automorphisms, splitting into the free product of $n - 1$ cyclic groups of order 2, were presented in [6].

Constructing faithful actions of free products of finite groups by finite state automorphisms of rooted trees it is natural to require that generators have as small number of states as it possible. The result obtained above is the best possible. Compare it with the faithful action of free products of finite groups obtained in [7] where the valency of vertices of the tree as small as it possible.

The question whether a self-similar action of

the free product of finite groups, at least one of them having order at least 3, exist or not is still open.

References

1. *Bhattacharjee M.* The ubiquity of free subgroups in certain inverse limits of groups/ M. Bhattacharjee // Journal of Algebra. - 1995. - 172. - p.134-146.
2. *Oliynyk A.S.* Free products of C_2 as groups of finitely automatic permutations/ A.S. Oliynyk // Вопросы алгебры. - 1999. - вып.14. - с.158-165.
3. *Brunner A.M.* Endomorphisms of the finitary group of isometries of the binary tree/ A.M. Brunner, S.N. Sidki // in "Topological and asymptotic aspects of group theory" (edited by R.Grigorchuk et al.) Providence, RI: American Mathematical Society (AMS) Contemporary Mathematics 2006. - 394. - p.221-234.
4. *Savchuk D.* Automata generating free products of groups of order 2/ D.Savchuk, Ya.Vorobets, 2008, arxiv.org/abs/0806.4801, 19p.
5. *Заровный В.П.* Автоматные подстановки и сплетения групп/ В.П. Заровный // ДАН СССР. - 1965. - 160. - № 3. - с.562-565.
6. *Lavrenyuk Y.* Faithful group actions on rooted trees induced by actions of quotients/ Y. Lavrenyuk, V. Mazorchuk, A. Oliynyk, V. Sushchansky // Communications in Algebra. -2007. - 35. - p.3759-3775.
7. *Gupta C.K.* Free products of finite groups acting on regular rooted trees/ C.K. Gupta, N.D. Gupta, A.S. Oliynyk // Algebra and Discrete Mathematics. -2007. - № 2. - p.91-103.

Надійшла до редакції 30.04.2010

УДК 530.145.

В.С. Ольховський, д.ф.-м.н., професор

Час як квантова спостережувана, канонічно спряжена до енергії, та основи часового аналізу квантових процесів

Представлений короткий обсяг робіт з вивчення часу як квантової спостережуваної, канонічно спряженої до енергії. Цей обсяг має справу з максимальним ермітовим та квазі-самоспряженим оператором часу для неперервних спектрів та дискретних спектрів енергій, відповідно. Потім перелічені деякі застосування часового аналізу квантових процесів тунелювання. Нарешті, запропоновані деякі перспективи для майбутніх досліджень молодих пошукачів.

Ключові слова: час як квантова спостережувана, канонічно спряжена до енергії; максимальний ермітов оператор; квазі-самоспряжений оператор; час тунелювання

E-mail: olkhovsk@mail.ru

1. Introduction

During almost ninety years, beginning from [1], it is known that time cannot be represented by a self-adjoint operator, with the exception of special abstract systems (such as an electrically charged particle in an infinite uniform electric field and a system with the limited from both below and above energy spectrum). The list of papers devoted to the problem of time in quantum mechanics is extremely large (see, for instance, [2-17], and references therein). The first set of known and cited articles is [2-7]. The second set of papers on time as an observable in quantum physics [8-18] appeared from the end of the eighties and chiefly in the nineties and more recently, stimulated mainly by the need of a self-consistent definition for collision duration and tunneling time. It is noticeable that many of this second set of papers appeared however to ignore the Naimark theorem from [19], which had previously constituted an important basis for the results in [5-7]. This Naimark theorem states [19] that the non-orthogonal spectral decomposition $E(\lambda)$ of a hermitian operator H is of the Carleman type (which is unique for the maximal hermitian operator), i.e. it can be approximated by a succession of the self-adjoint operators, the spectral

V.S. Olkhovsky, Prof. Dr.

Time as a quantum observable, canonically conjugated to energy, and foundations of time analysis of quantum processes

There is presented a short review of papers with the results of the study of time as a quantum observable, canonically conjugate to energy. This review deals with the maximal hermitian and quasi-self-adjoint time operator for continuous energy spectra and discrete energy spectra, respectively. Then some applications of time analysis of quantum processes (tunneling phenomena) are enlisted. Finally, some perspectives for future investigations of young researchers are presented.

Key Words: time as a quantum observable, canonically conjugated to energy; maximal hermitian operator; quasi-self-adjoint operator; tunneling time.

functions of which do weakly converge to the spectral function $E(\lambda)$ of the operator H . Namely, by exploiting that Naimark theorem, it has been shown in [2-7] (more details having been added in [17, 18]) that, for systems with continuous energy spectra, time can be introduced as a quantum-mechanical observable, canonically conjugate to energy. More precisely, the time operator resulted to be maximal hermitian, even if not self-adjoint. Now let us analyse the so-called *positive-operator-value-measure* (POVM) approach, often used in the second set of papers on time in quantum physics (for instance, in [9-16]). This approach, in general, is well-known in the various approaches to the quantum theory of measurements approximately from the sixties and had been applied in the simplest form for the time-operator problem in the case of the free motion already in [20]. Then, in [9-16] it was affirmed that the generalized decomposition of unity (or POV measures) is reproduced from any self-adjoint extension of the time operator into the space of the extended Hilbert space (usually, with negative values of energy E in the left semi-axis) citing the Naimark's dilation theorem from [21]. However, it was realized factually only for the simple cases like the particle free motion. As to our approach, it is based on another Naimark's theorem

(from [19]), cited above, and *without* any extension of the physical Hilbert space of usual wave functions (wave packets) with the subsequent return projection to the previous space of wave functions; and, moreover, it had been published in [5-7] much earlier than [9-16]. Being based on the earlier published remarkable Naimark theorem [19], it is *much more direct, simple and general, and at the same time mathematically not less rigorous* than POVM approach!

2. Time as a quantum observable and general definitions of the mean durations of quantum processes for systems with continuous energy spectra.

For systems with continuous energy spectra, the following simple operator, canonically conjugate to energy, can be introduced for time:

$$\hat{t} = \begin{cases} t & \text{in the (time) } t\text{-representation,} \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial E} & \text{in the (energy) } E\text{-representation} \end{cases} \quad (1a)$$

(1b)

which is not self-adjoint, but is *hermitian*, and acts on square-integrable space-time wave packets in representation (1a), and on their Fourier-transforms in representation (1b), once the point $E=0$ is eliminated (i.e., once one deals only with moving packets, i.e., excludes any *non-moving* back tails, as well as, of course, the zero flux cases). The elimination of the point $E=0$ is not restrictive since the "rest" states with the zero velocity, the wave-packets with *non-moving* rear tails, and the wave-packets with zero flux are unobservable.

Operator (1b) is defined as acting on the space P of the continuous, differentiable, square-integrable functions $f(E)$ that satisfy the conditions

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |f(E)|^2 dE < \infty; \quad \int_0^\infty |\partial f(E) / \partial E|^2 dE < \infty; \\ \int_0^\infty |f(E)|^2 E^2 dE < \infty, \end{aligned} \quad (2)$$

and the condition

$$f(0) = 0 \quad (3)$$

which is a space P dense in the Hilbert space of L^2 functions defined (only) over the semi-axis $0 \leq E < \infty$. Obviously, the operator (1a,b) is hermitian, i.e. the relation $(f_1, \hat{t} f_2) = ((\hat{t} f_1), f_2)$ holds, only if all square-integrable functions $f(E)$ in the space on which it is defined vanish for $E=0$.

Operator $\hat{t}$ has no hermitian extension because otherwise one could find at least one function $f_0(E)$ which satisfies the condition $f_0(0) \neq 0$ but that is

inconsistent with the propriety of being hermitian. So, according to [22], $\hat{t}$ is a maximal hermitian operator and in accordance with the results of the mathematical theory of operators it is not a self-adjoint operator. Essentially because of these reasons, earlier Pauli (see, for instance, [1]) rejected the use of a time operator: and this had the result of practically stopping studies on this subject for about forty years. However, as far back as in [23] von Neumann had claimed that considering in quantum mechanics only self-adjoint operators could be too restrictive.

By the way, one can easily demonstrate [2] that in the case of hypothetical quantum-mechanical systems with the continuous energy spectra *bounded from below and from above* ($E_{\min} < E < E_{\max}$) the time operator (1a,b) becomes a *really self-adjoint operator* and has a discrete time spectrum, with the "the time quantum" $\tau = \hbar / d$ where $d = |E_{\max} - E_{\min}|$.

In order to consider *time as an observable in quantum mechanics* and to define the observable mean times and durations, one needs to introduce not only the time operator, but also the measure (or weight) of averaging over time. In the simple one-dimensional (1D) and one-directional motion such *measure* (weight) can be obtained by the simple quantity:

$$W(x,t)dt = \frac{j(x,t)dt}{\int_{-\infty}^{\infty} j(x,t)dt}, \quad (4)$$

where the probabilistic interpretation of $j(x,t)$ (namely in *time*) corresponds to the flux probability density of a particle passing through point x at time t (more precisely, passing through x during a unit time interval centered at t), when travelling in the positive x -direction.. Such a measure had not been postulated, but is just a direct consequence of the well-known probabilistic (*spatial*) interpretation of $\rho(x,t)$ and of the continuity relation

$$\partial \rho(x,t) / \partial t + \text{div } j(x,t) = 0 \quad (5)$$

for particle motion in the description of the 1D Schroedinger equation. Quantity $\rho(x,t)$ is the probability of finding a moving particle inside a unit space interval, centered at point x , at time t . The probability density $\rho(x,t)$ and the flux probability-density $j(x,t)$ are related with the wave function $\Psi(x,t)$ by the usual definitions $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ and $j(x,t) = \text{Re} [\Psi^*(x,t) (-i\hbar \mu) \partial \Psi(x,t) / \partial x]$.

The measure (4) was firstly investigated in [7,8].

When the flux density $j(x,t)$ changes its sign, the quantity $W(x,t)dt$ is no longer positive definite and it acquires a physical meaning of a probability

density *only* during those partial time-intervals in which the flux density $j(x,t)$ does keep its sign. Therefore, let us introduce the two measures, by separating the positive and the negative flux-direction values (i.e., flux signs):

$$W_{\pm}(x,t)dt = \frac{j_{\pm}(x,t)dt}{\int_{-\infty}^{\infty} j_{\pm}(x,t)dt} \quad (4a)$$

with $j_{\pm}(x,t) = j(x,t)\Theta(\pm j)$ where $\Theta(z)$ is the Heaviside step function. It had been made firstly in [8] (see also [17,18]).

Then, one can eventually define the mean value $\langle t(x) \rangle$ of the time t at which a particle passes through position x (when travelling in only one positive x -direction), and $\langle t_{\pm}(x) \rangle$ of the time t at which a particle passes through position x , when travelling in the positive or negative direction, respectively:

$$\langle t(x) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} tj(x,t)dt}{\int_{-\infty}^{\infty} j(x,t)dt} = \frac{\int_0^{\infty} dE \frac{1}{2} [G^*(x,E) \hat{t} v G(x,E) + v G^*(x,E) \hat{t} G(x,E)]}{\int_0^{\infty} dE v |G(x,E)|^2} \quad (7a)$$

where $G(x,E)$ is the Fourier-transform of the moving one-dimensional (1D) wave packet

$$\Psi(x,t) = \int_0^{\infty} G(x,E) \exp(-iEt/\hbar) dE = \int_0^{\infty} g(E) \varphi(x,E) \exp(-iEt/\hbar) dE \quad (8)$$

when going on from the time representation to the energy one, and

$$\langle t_{\pm}(x) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} tj_{\pm}(x,t)dt}{\int_{-\infty}^{\infty} j_{\pm}(x,t)dt}, \quad (7b)$$

and also the mean durations of particle 1D transmission from x_i to $x_f > x_i$ and 1D particle reflection from the region (x_i, ∞) into $x_f \leq x_i$:

$$\langle \tau_T(x_i, x_f) \rangle = \langle t_{\pm}(x_f) \rangle - \langle t_{\pm}(x_i) \rangle \quad (7c)$$

and $\langle \tau_R(x_i, x_f) \rangle = \langle t_{\pm}(x_f) \rangle - \langle t_{\pm}(x_i) \rangle$,

respectively. The three-dimensional motions can be similarly analyzed (as it had been made in [7,18]).

Now, one can see that two canonically conjugate operators, the time operator (1) and the energy operator

$$\hat{E} = \begin{cases} E & \text{in the energy (E-) representation,} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} & \text{in the time (t-) representation,} \end{cases} \quad (9)$$

satisfy the typical commutation relation

$$[\hat{E}, \hat{t}] = i\hbar. \quad (10)$$

Although up to now according to the Stone and von Neumann theorem the relation (10) has been interpreted as holding *only* for the pair of the self-adjoint canonically conjugate operators, in both representations, and it was not directly generalized for *maximal hermitian operators*, the difficulty of such direct generalization has in fact been by-passed by introducing $\hat{t}$ with the help of the *single-valued* Fourier (Laplace)-transformation from the t -axis ($-\infty < t < \infty$) to the E -semi-axis ($0 < E < \infty$) and by utilizing the peculiar mathematical properties of maximal hermitian operators (as in [14,17,18]), described in detail, e.g., in [22].

Actually, from eq.(10) the uncertainty relation

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2 \quad (11)$$

(where the standard deviations are $\Delta a = \sqrt{Da}$, quantity Da being the variance $Da = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2$; and $a = E, t$, while $\langle \dots \rangle$ denotes an average over t by the measures $W(x,t)dt$ or $W_{\pm}(x,t)dt$ in the t -representation or an average over E similar to the right-hand-part of (7a) and (8) in the E -representation) was derived by the simple generalizing of the similar procedures which are standard in the case of self-adjoint canonically conjugate quantities (see [7,14,17,18]).

After what precedes, one can state that, for systems with continuous energy spectra, the mathematical properties of the maximal hermitian operators (described, in particular, in [17,18,22]), like $\hat{t}$ in eq.(1), are *sufficient* for considering them as quantum observables: Namely, the *uniqueness* of the "spectral decomposition" (also called spectral function) for operators $\hat{t}$, as well as for $\hat{t}^n$ ($n > 1$) guarantees (although such an expansion is not orthogonal) the *equivalence* of the mean values of any analytic functions of time, evaluated either in the t - or in the E -representations.

From this point of view, there is *no practical difference between self-adjoint and maximal hermitian operators* for systems with continuous energy spectra, and, moreover, the *mathematical properties* of $\hat{t}^n$ ($n > 1$) are quite enough for considering *time as a quantum-mechanical observable* (like for energy, momentum, spatial

coordinates,...) without having to introduce any new physical postulates.

3. Time as an observable and time-energy uncertainty relation for quantum-mechanical systems with discrete energy spectra.

For systems with discrete energy spectra it is natural (following [17,18]) to introduce wave packets which are represented as the super-positions of the orthogonal and normalized wave functions of system bound states. These wave packet are periodic functions of time with the period (*Poincaré cycle time*) $T = 2\pi^* / D$, D being the maximal (or the quasi-maximal) common divisor of distances between system energy levels. And the time operator $\hat{t}$, has to be also a periodical function of time t (a so-called saw-function of t) which is the quasi-self-adjoint time operator. In [17,18] the respective form of the uncertainty relation was obtained that *passes to uncertainty relation (7)* for systems with continuous spectra, for sufficiently small standard time deviations Δt .

4. Time analysis of quantum processes, based on the application of time as a quantum observable.

Here we limit ourselves by only some important results:

- (1) Time analysis of various propagations for non-relativistic particles and photons revealed not only the similarity for non-relativistic-particle and photon propagating but also permitted to introduce the maximal hermitian operator of time also for quantum electrodynamics (see, in particular, [8,17,18]).
- (2) There are known two measures of averaging on time in quantum mechanics(see, for example, [8,17,18]): Earlier it was exposed a measure of averaging on passing (motion) of a particle or of a photon, the second measure characterizes the accumulation or dwelling (or sojourning) of particles or photons in the limited space volume during their passing through it.
- (3) Deduced here uncertainty relations for time and energy with applying the properties of the time operator can help to stop endless debates which had begun from [24-25] about the interpretation of the time-energy uncertainty relation.
- (4) *Time analysis of tunneling processes:*
 - (a) Actually, the time operator (1) has been rather fruitfully used in the case of the tunneling times (see [8,14,17,18]). There was established that *practically all earlier known particular tunneling times appear to be the special cases of the mean tunneling*

time or of the square root of the variance in the tunneling-time distribution (or pass into them under some boundary conditions), defined within the general approach. It had been carried out in some reviews also the connection of other earlier known approaches or simultaneously elaborated approaches with the O-R approach which had been recognized as the most self-consistent definition of the tunnelling time within the conventional quantum mechanics (see, for instance, [26]).

- (b) Although there is no classical limit for particle motions inside potential barriers in the case of sub-barrier kinetic energies, there are nonzero probability density and nonzero probability flux density inside such barriers due to the particle wave properties. It is meaningful to stress also that, although any direct classical limit for particle tunnelling through potential barrier with sub-barrier energies is really absent, *there is the direct classical limit for wave- packet tunneling.* Let us recall *real evanescent and anti-evanescent waves*, well-known in *classical optics* and in *classical acoustics* (see, for instance, [18, 27, 28]).
- (c) The Hartman effect was revealed and analyzed (see, for instance, [8, 14, 17, 18]). It consists in the independency of tunneling times from the barrier width for large (opaque) barriers both for total exit peaks and also for every peak portion outwards from a barrier during any step of multiple internal reflections. In the case of total exit peak outwards from the back barrier wall this was confirmed experimentally for electromagnetic (microwave) tunnelling in [29-31].

5. Some perspectives for young researchers:

- (a) A generalization of time analysis for more complicated particle and photon motions (i.e. such as along helixes and for motions through two-dimensional and three-dimensional (non-spherical) potentials and barriers).
- (b) The quantum time analysis can be extended for the study of new relativistic cosmic quantum processes going in near black holes, using the phenomenon of the Klein paradox for relativistic tunnelling of spin 0- and spin $\frac{1}{2}$ -particles (see firstly for acquaintance [31,32]).

(c) It is rather interesting and perspective to develop the time analysis of the whole-universe tunnelling through the barrier of the quantum gravitation curve during the initial Big-Bang inflation period, starting from the Hamiltonian approach to time operator (see firstly, for instance, in [17,18]), defined by the operator equation $[H, T] = i\hbar$, and, using then the dual equations $H\Psi = i\hbar\partial\Psi/\partial t$ and $T\Phi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial E}\Phi$, Φ being the Fourier-component of $\Psi = \int dt e^{-iEt/\hbar} \Phi(E)$.

References

1. W. Pauli, in: *Handbuch der Physik*, vol.5/1, ed. by S. Fluegge (Berlin, 1926), p.60.
2. F. Engelman and E. Fick, *Z. Phys.*, 175 (1963) 271; 178 (1964) 551.
3. D.M. Rosenbaum, *J. Math. Phys.*, 10 (1969) 1127-1144.
4. V.S. Olkhovsky and E. Recami, *Nuovo Cim.*, A53 (1968) 610; A63 (1969) 814.
5. V.S. Olkhovsky, E. Recami and A. Gerasimchuk, *Nuovo Cim.*, A22 (1974) 263.
6. A.S. Holevo, *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory* (Amsterdam, 1982).
7. V.S. Olkhovsky, *Sov. J. Part. Nucl.*, 15 (1984) 130.
8. V.S. Olkhovsky and E. Recami, *Phys. Reports*, 214 (1992) 339; V.S. Olkhovsky, E. Recami, F. Raciti,
8. D.H. Kobe and V.C. Aguilera-Navarro, *Phys. Rev.*, A50 (1994) 933.
9. V. Delgado, *Phys. Rev.*, A59 (1999) 1010.
10. J. Muga, J. Papao and C. Leavens, *Phys. Lett.*, A253 (1999) 21.
11. D.H. Kobe, H. Iwamoto, M. Goto, and V.C. Aguilera-Navarro, *Phys. Rev.*, A64 (2001) 022104.
12. J. Muga, I. Egusquiza, J. Damborenea and F. Delgado, *Phys. Rev.*, A66 (2002) 042115.
13. V.S. Olkhovsky, E. Recami, J. Jakiel, *Phys. Rep.*, 398 (2004) 133.
14. A. Gózdź, M. Dębicki, *Phys. At. Nuclei*, 70 (2007) 529.
- 15.
16. Zhi-Yong Wang, Cai-Dong Xiong, *Annals of Physics*, 322(2007) 2304.
17. V.S. Olkhovsky, E. Recami, *I.J. Mod. Phys.*, A22 (2007) 5063;
18. V.S. Olkhovsky, *Time as a Quantum Observable, Canonically Conjugated to Energy*, *Advances in Mathem. Phys.*, v. 2009 (2009), article ID 859710, doi:10.1155/2009/859710
19. M.A. Naimark, *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Matematicheskaya*, 4 (1940) 277
20. U. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.*, 122 (1961) 1649
21. M.A. Naimark, *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, seriya Matematika*, 7(1943)237.
22. N.I. Akhiezer and I.M. Glazman, *The Theory of Linear Operators in Hilbert Space* (Pitman; Boston, Mass., 1981).
23. J. von Neumann, *Mathematischen Grundlagen der Quantum Mechanik* (Hizzel, Leipzig, 1932).
24. N.S. Krylov and V.A. Fock, *Sov. J. Zhetf*, 17 (1947) 93.
25. U. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.*, 122 (1961) 1649; B134 (1964) 1417.
26. M. Abolhasani and M. Golshani, *Phys. Rev.*, A62 (2000) 012106.
27. H. Chew, Dau-Sing Wang, and M. Kerker, *Applied Optics*, 18 (1979) 2679.
28. K.L. Chandiramani, *J. Acoustical Soc. Am.*, 55 (1974) 19.
29. A. Enders and G. Nimtz, *J. Phys.-I (France)*, 2 (1992) 1693, 3 (1993) 1089; *Phys. Rev.*, B47 (1993) 19605, E48 (1993) 632
30. A.M. Steinberg, P.G. Kwiat and R.Y. Chiao, *Phys. Rev. Lett.*, 71(1993)708; R.Y. Chiao and A.M. Steinberg, *Tunneling Times and Superluminality*, in: *Progress in Optics*, ed. by E. Wolf, v.37, Elsevier Sci., Amsterdam, 1997, pp.346-405.
31. S. Longhi, P. Laporta, M. Belmonte and E. Recami, *Phys. Rev.*, E65 (2002) 046610.
32. Dombey N., Calogeracos A., *Phys. Rep.*, 314 (1999) 41-58.
33. P. Krekora, Q. Su, and R. Grobe, *Phys. Rev. Letters*, 92 (2004), 040406

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 539.164; 539.166; 539.152; 524.1

В.С.Ольховський, М.Е.Долінська

Модифікація методів ядерної хронометрії в астрофізиці та геофізиці

В цій роботі ми презентуємо новий квантово-механічний підхід для вивчення еволюції α -розпаду з врахуванням таких збуджених станів та багаторазових γ -випромінювань та γ -поглинань всередині зірок та під впливом космічної радіації на поверхні Землі. Наводяться деякі оціночні приклади. Це призводить до висновку, що звичайний (не коректний) "ядерний годинник" визначає не реальну величину, а тільки верхню межу тривалості процесів α -розпаду у зірках, та планетах.

Ключові слова: нуклеосинтез; альфа-розпад збуджених радіоактивних ядер; гама-розпад; гама-збудження; космічне випромінювання

E-mail: olkhovsk@kinr.kiev.ua, olkhovsky@mail.ru

Статтю представив к.ф.-м.н. Кондратьєв В.М.

V.S.Olkhovsky, M.E.Dolinska

To the modification of methods of nuclear chronometry in astrophysics and geophysics

In this paper we present a new quantum-mechanical approach for the description of the α -decay evolution with considering of such excited states and multiple γ -radiations and γ -absorptions inside the stars and under the influence of the cosmic radiation on the earth surface. Some examples with the simple estimations are presented. They bring to the conclusion that the usual (non-corrected) "nuclear clocks" do really indicate not to realistic values but to the upper limits of the durations of the α -decay stellar and planet processes.

Key words: nucleosynthesis; alpha-decay of excited states of radioactive nuclei; gamma-decay; gamma-excitation; cosmical rays.

1. Introduction. The α -decays of nuclei-chronometers from the only ground states are usually taken into account in the practical applications of the standard methods of nuclear chronometry for the stellar and terrestrial processes. The nuclear cosmic nucleo-synthesis includes also the analysis of formation of the initial long-living isotopes during s - and r -processes. In these processes, inside stars and supernova not only the ground states but also all possible excited states of synthesized nuclei are being formed as a result of nucleon radiation captures (n, γ) and (p, γ) (see, for instance, [1-3]).

And from the Geiger and Nutall α -decay law it follows directly that the lifetime τ_{exc} of the α -decaying nucleus does very strongly depend on the α -particle kinetic energy. In many cases the lifetime τ_{exc} is diminished by several orders with the increasing of the α -particle energy by 1-2 MeV!

But up to now no systematic experimental study of the excited radioactive nuclei relative to the α -decays on their excitation energy had been undertaken in the analysis of lifetimes because of the much more rapid (within 10^{-13} - 10^{-9} sec) and so strong γ -decays of the excited nuclei. Previously it had usually assumed that there is no practical reason to take into account the much more slow and so

weak processes of the α -decays from the excited states.

It had been firstly supposed in [2,3] that inside large masses of stellar substance a part of radioactive nuclei could be supported in the excited states during a long time due to the chains of subsequent emissions and quasi-resonance absorptions of γ -quanta by nuclei-chronometers if the energy losses, caused by recoils during emitting and absorbing, are compensated by the nucleus thermal kinetic energy. The formation of the excited states of the α -radioactive nuclei in the terrestrial surface layers and in the meteorites is also present under the influence of the weak but constant cosmic radiation. Further, it is experimentally shown in [4] that the lifetime of the β -radioactive isotope ^{187}Re in a bare (without electrons) atom is less 10^9 times than the lifetime of the usual atom with totally filled electronic shell (it becomes ~ 30 years instead of $\sim 3 \cdot 10^{10}$ years!). And it is known that the stellar matter is in the plasma state with the free nuclei and electrons. So, the nuclei partially or totally are being deprived their electronic shells inside the stars.

2. Nuclear chronometry in stars. In this paper we shall deal with α -radioactive nuclei-chronometers. In the standard nucleo-chronometry techniques (see, for instance, [1]) one uses the abundances P and D of parent and daughter nuclei. They are connected

with the decay function $L(t-t_0) = \exp(-\Gamma_0(t-t_0)/\square)$ (Γ_0 being the α -decay width of the ground state, t_0 being an initial time) and the surviving function $W(t) = 1 - L(t)$, defined and utilized in [8-11], by the following evident relations:

$$L(t-t_0) = P(t)/P(t_0), \quad W(t-t_0) = [P(t) - P(t_0)]/P(t_0) \quad (1)$$

and

$$P(t) + D(t) = P(t_0) + D(t_0), \quad (2)$$

or

$$D(t) - D(t_0) = P(t_0)W(t-t_0) = P(t)[\exp(\Gamma_0(t-t_0)/\square) - 1]. \quad (2a)$$

Usually equality (2a) is divided by the abundance of another stable isotope D_s , which does not obtain any contribution from the decay of the parent nuclei (i.e. D_s does not depend on time). As a result, (2a) acquires the following form

$$p(t) [\exp(\Gamma_0(t-t_0)/\square) - 1] - d(t) + d(t_0) = 0 \quad (2b)$$

where $p = P/D_s$ and $d = D/D_s$. Measuring $p = P/D_s$ and $d = D/D_s$ in different samples (or in different separate parts of the same sample), we obtain the plot (2b) at the plane $p = P/D_s$, $d = D/D_s$ which has the form of a straight line, the slope of which with respect to axis p does simply permit to define age $t-t_0$ (see, for instance, [1]).

For the description of the α -decay evolution inside stars and under the cosmic radiation on the earth surface we shall use the Krylov-Fock theorem [7] (see also its generalization in [8,9] and [11]):

$$L(t-t_0) = |\langle \Psi(t-t_0) | \Psi(t_0) \rangle|^2 = |f(t-t_0)|^2 / |f(t_0)|^2 \quad (3)$$

where

$$f(t-t_0) = \langle \Psi(t-t_0) | \Psi(t_0) \rangle = \int_0^\infty |G(E)|^2 \exp[-iE(t-t_0)/\square] dE \quad (4)$$

is the characteristic function for the energy (E) distribution in a decaying state with the weight amplitude $G(E)$, t_0 is the chosen initial time moment and $\Psi(t_0)$ is normalized by the condition $|\Psi(t_0)| = 1$. The decay rate per a time unit is [8]

$$\rho(t-t_0) = d[1 - L(t-t_0)]/d(t-t_0). \quad (5)$$

When the decay is going on by several channels (for example, by α and γ -decays from the first excited state of the parent nucleus) we have [8]

$$\rho_{11}(t-t_0) = (\Gamma_1^*/\Gamma_1) d[1 - L_1(t-t_0)]/d(t-t_0) = (\Gamma_1^*/\square) \exp(-\Gamma_1(t-t_0)/\square) \quad (5a)$$

instead of (5) and the probability to be decayed by the i -th channel is described by

$$W_{11}(t-t_0) = \int_{t_0}^t \rho_{11}(t') dt' = (\Gamma_1^*/\Gamma_1) [1 - L_1(t-t_0)]$$

The decay of an ensemble of radioactive nuclei can go on simultaneously with its preparation (in particular, with the nucleo-synthesis or with decays from the previous state). One can use the following expression for the decay rate per a time unit:

$$I(t-t_0) = \int_{t_0}^t \rho_{11}^{(0)}(t') \rho_{00}^{(1)}(t-t') dt \quad (5b)$$

(which was generalized in [9]) with

$$\rho_{nn}^{(0)}(t) = [\delta_{n1}\Gamma_1^*/\Gamma_1 + \delta_{n0}] d[1 - L_n^{(0)}(t)]/dt$$

($m \neq n = 0, 1$), where decay functions $L_1^{(0)}(t)$ and $L_0^{(1)}(t)$ characterize the decay of the *initial* (first excited) state and the *subsequent* (ground) state, formed after the γ -decay of that initial one, respectively; $\Gamma_1 = \Gamma_\alpha^1 + \Gamma_\gamma^1$, Γ_α^1 and Γ_γ^1 being the α -decay and γ -decay widths of the excited parent α -radioactive nucleus (with the first excited state of the internal α -particle). Functions $L_1^{(0)}(t)$ and $L_0^{(1)}(t)$ are defined by the appropriate spectra of energy distributions $|G_1^{(0)}(E)|^2 = \text{const} / [(E_1 - E)^2 + \Gamma_1^2/4]^{-1}$ and $|G_0^{(1)}(E)|^2 = \text{const} / [(E_1 - E)^2 + \Gamma_1^2/4]^{-1} \cdot [(E_0 - E)^2 + \Gamma_0^2/4]^{-1}$, respectively. Here E_0 , E_1 and E denote the mean resonance (or level) energy of the ground state, the mean resonance energy of the first excited state and the factual energy in the system of the internal motion of a parent nucleus, respectively. At the usual approximation of the very small widths the lower limit 0 of the integral in (4) can be taken as $-\infty$ (see, for instance, [8-10] and references therein) and the calculation of decay functions $L_1^{(0)}(t)$ and $L_0^{(1)}(t)$ gives an exponential form for $L_1^{(0)}(t)$, i.e.

$$L_1^{(0)}(t-t_0) = L_1(t-t_0) = \exp[-\Gamma_1(t-t_0)/\square],$$

and at the additional approximation of very small quantities $\Gamma_1/(E_1 - E_0)$ and Γ_1/Γ_0 also an exponential form for $L_0^{(1)}(t-t_0)$, i.e.

$$L_0^{(1)}(t-t_0) = L_0^{(0)}(t-t_0) = \exp[-\Gamma_0(t-t_0)/\square].$$

In the approximation of the single (one-step) absorptions of the emitted γ -quanta after the γ -decay one can use the expression $M(t) = q M_0 \exp(-ct/\mu)$ (with c , μ and q being the light velocity, the inversed γ -quanta absorption coefficient inside the matter and the dimensionless quantity, which depends on small loss of the γ -quantum energy due to the γ -scattering by nuclei and by electrons, respectively) for the γ -quanta propagation inside the matter sample [4,5]. After the simplifications at the additional approximations $\epsilon_{\text{recoil}} \sim (E_1 - E_0)^2 / 2Am_n c^2$ (A and m_n being the atomic number of parent nucleus and the mean nucleon mass, respectively), $D \sim 2[\epsilon_{\text{recoil}} kT]^{1/2}$ (k and T being the

Boltzman constant and the sample temperature, respectively), $\Gamma_0 \ll \Gamma_1$, $c\hbar/\mu$ and $t - t_0 \gg \hbar/\Gamma_1$, μ/c and also considering the diminution of *directly* decaying parent nuclei due to the γ -absorption, one obtains the following expression:

$$D(t) = D(t_0) + [P_0(t_0) + P_1(t_0) [1 - \exp(-\Gamma_0(t - t_0)/\hbar)] + P_1(t_0)Q_\lambda [1 - \exp(-\Gamma_0(t - t_0)/\hbar)] \quad (6a)$$

with

$$Q_\lambda = (\Gamma_\alpha/\Gamma_1)qM_0[P_0(t_0) + P_1(t_0)(2\Gamma_1 + c\hbar/\lambda)] / 2(\Gamma_1 + c\hbar/\lambda),$$

or

$$D(t) = D(t_0) + [P_0(t_0) + (1 - Q_\lambda)P_1(t_0)] [1 - \exp(-\Gamma_0(t - t_0)/\hbar)] + Q_\lambda P_1(t_0), \quad (6b)$$

P_0 and P_1 being the abundances of the ground and the excited states of the parent α -radioactive nuclei, respectively. The tentative estimations of q give values which are approximately within (1/2, 1).

Taking into account not only single (one-step) γ -absorptions but all possible *multiple* γ -absorptions, one can evaluate an every step of γ -absorptions by an equal contribution with $M \equiv qM_0(2\Gamma_1 + c\hbar/\lambda)/2(\Gamma_1 + c\hbar/\lambda)$ and easily sum up them in (6a) or (6b). Then, if Γ_α/Γ_1 is not very small (let us say, ≥ 0.1), one can also roughly take $N\Gamma_\alpha/\Gamma_1 \equiv 1$ in (6b) (N being an effective number of the considered γ -absorptions steps). We can confirm such valuations with the help of the simple evident reasoning. For the lifetimes $\tau_\gamma = \hbar/\Gamma_\gamma$ larger than 10^{-13} sec and $\Gamma_\gamma^1 \ll D$ and, moreover, for $A \equiv 250$, $\varepsilon_\gamma \equiv 50$ keV and $N \equiv 10$ the quantity $N\varepsilon_{\text{recoil}}$ satisfies the following expressions

$N\varepsilon_{\text{recoil}} < D$ when $T > 300$ K (for the terrestrial lumps) and

$N\varepsilon_{\text{recoil}} \ll D$ when $T \equiv 10^9$ K (inside the stars).

Although up to now the partial α -decay widths for excited states experimentally are not studied we can expect that the condition $N < 10$ is rather realistic on account of the Geiger and Nutall law, at least for the high-energy excited states. If the values of Γ_γ and $N\varepsilon_{\text{recoil}}$ get into such spreads D we can generalize (6b) for the multiple γ -absorptions and write (with $Q_\lambda \rightarrow q$)

$$D(t) = D(t_0) + [P_0(t_0) + P_1(t_0)(1 - q)] [1 - \exp(-\Gamma_0(t - t_0)/\hbar)] + qP_1(t_0) \quad (6c)$$

and hence

$$D(t) = D(t_0) + P_0(t_0) [1 - \exp(-\Gamma_0(t - t_0)/\hbar)] + P_1(t_0) \quad (6d)$$

at the approximation of $q \rightarrow 1$.

The results (6c) and (6d) are valid at the approximations of infinitely large medium volumes, and sufficiently large times $t - t_0$ (which are much larger than mean lifetimes of excited states and mean times of the free flight of γ -quanta inside the medium and also than times of quantum oscillations caused by different interference processes described by applying the Krylov-Fock theorem, generalized in [6,7]) and at the condition $(\Gamma_0/\Gamma_\alpha^1)N \geq 1$.

Let us analyze the new relation (6a) or (6c) in comparison with the previously known equation (2b). They are basic for the determination of the age of a pattern but under the different conditions: with and without taking into account the intermediate γ -absorptions inside the sample matter. For the clarity it is convenient to rewrite (2b), taken for the same conditions as (6d), using the same terms as in (6d), in the following equivalent form:

$$D(t) = D(t_0) + [P_0(t_0) + P_1(t_0)] [1 - \exp(-\Gamma_0(t - t_0)/\hbar)] \quad (2c)$$

From the simple comparison of (2c) and (6d) one can see that

- (i) for the same $D(t_0)$, $P_0(t_0)$, $P_1(t_0)$, t_0 and Γ_0 at any moment t the value of $D(t)$ in (6d) is larger than in (2c) by the quantity $P_1(t_0) \exp(-\Gamma_0(t - t_0)/\hbar)$;
- (ii) the same value $D(t)$ is obtained in (4d) at an earlier moment t than in (2c);
- (iii) the larger is the contribution of P_1 into the sum $P_0 + P_1$, the earlier is the moment t in (6d) in comparison with (2c) at which the same value of $D(t)$ is obtained.

Now we illustrate the inference (ii) by the following instance:

if $P_0(t_0) = P_1(t_0) = (1/2)P(t_0)$, then the same value of $D(t)$ is obtained for the values of $t = t_{\text{usual}}$ in (2c) and $t = t_{\text{real}}$ in (6c) which are connected by the following striking relation

$$t_{\text{real}} = t_{\text{usual}} - (\Gamma_0/\hbar) \ln 2 \quad (7)$$

(of course, we imply that $t_{\text{usual}} - t_0 > (\Gamma_0/\hbar) \ln 2$).

The table 1 represents the impressive calculation results for the α -decay of the nucleus-chronometer ^{238}U with the lifetime $4.5 \cdot 10^9$ years on the base of (7).

t_{real} , years	$1 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^5$	$0.8 \cdot 10^6$	$1.8 \cdot 10^9$
t_{usual} , years	$3.3201 \cdot 10^9$	$3.321 \cdot 10^9$	$3.4 \cdot 10^9$	$3.5 \cdot 10^9$

t_{real} , years	$2 \cdot 10^3$	$4 \cdot 10^3$	$6 \cdot 10^3$	$8 \cdot 10^3$
t_{usual} , years	$3.32002 \cdot 10^9$	$3.32004 \cdot 10^9$	$3.32006 \cdot 10^9$	$3.32008 \cdot 10^9$

So, sometimes billions years obtained by the usual nuclear-chronometry method can correspond to several thousands years. Of course, the results (i) and (ii) will be even stronger if one will consider more than one excited state of the parent nuclei with the excited internal α -particles and also chains of the successive decays of every star chronometer.

Now it is possible to state that the usual (non-corrected) "nuclear clocks" do really indicate to the *upper limits* of the durations of real α -decay processes.

3. Nuclear chronometry in geophysics.

Now we consider the revision of the methods of the terrestrial nuclear chronometry taking into account the relatively weak but constant cosmic radiation on the upper earth layers up to the depth of ~ 5 meters. Under the influence of the cosmic radiation, the following processes are going on: (1) the constant formation of the excited nuclei-chronometers with the smaller life-times than for the nuclei-chronometers in the ground state, (2) the effective acceleration of the α -decay through knocking-out the α -particles by cosmic protons and (3) the constant nonzero removal of nuclei-chronometers through the channels of inevitable rearrangement nuclear reactions. These processes lead to the real diminishment of the results of measurements of the decay times.

Let us analyze the diminishment caused by the first and the second kinds of processes.

In our case, taking into account the cosmic radiation (supposing its flux to be constant in time) and using the same method of the generalization of the Krylov-Fock theorem as in [6,7], we, instead of $L(t-t_0)$ (with the consequences (1)-(2)), obtain:

$$L_P(t-t_0) = [1 - a(t-t_0)]L(t-t_0) \quad (8)$$

for a unit (1 cm^3) chronometer volume, where $a = j_{\text{cosm}} \sigma v n$, j_{cosm} is the cosmic (mainly proton) radiation flux (in $\text{cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$), σ is the total cross section of all reaction proton-chronometer processes with the removal of the nuclei-chronometers, v is the number of multiple collisions in the medium after the first proton-chronometer collision and n is the mean nucleus-chronometer number along the 1 cm-depth and $L_P(t-t_0)$ includes all parent-nucleus diminutions through collisions of chronometers with cosmic protons. Here for the simplicity we neglect the elastic and inelastic scattering. We see that for $t-t_0 \geq 1/a$ $L_{P \rightarrow 0}(t-t_0) = 0$ and $P(t-t_0) = 0$.

If we select only the reactions $(p, p \alpha)$ with the general cross section σ_D which strongly accelerate

the emission of the α -particles with the formation of daughter nuclei, neglecting all other processes, then we obtain the particular relation

$$L_{P \rightarrow D}(t-t_0) = [1 - a_D(t-t_0)]L(t-t_0) \quad (8a)$$

where $a_D = j_{\text{cosm}} \sigma_D v$, and $L_{P \rightarrow D}(t-t_0)$ denotes the decay function in this case. And in this case relation (2b) passes into

$$P(t)[[1 - a_D(t-t_0)]\exp(\Gamma_D(t-t_0)/\square) - 1] - d(t) + d(t_0) = 0. \quad (2c)$$

From the comparison of (2c) with (2b) one can see that when $t-t_0 \rightarrow 1/a$ the time duration defined by the old method (without taking the cosmic radiation into account) becomes very large – much more than $\Gamma_D/\square$.

For qualitative evaluations we have taken $\sigma_D = 3 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^2$ and v between $10^2 \div 10^3$ for the mean proton energy $\sim 10^8 \text{ eV}$, the flux $j_{\text{cosm}} = 0.85 (\text{cm}^2 \text{ sec})^{-1}$ in the top atmosphere layer or $1.75 \cdot 10^{-2} (\text{cm}^2 \text{ sec})^{-1}$ on the sea level [10] and $n = 1 \text{ cm} / 3 \cdot 10^8 \text{ cm} = 0.33 \cdot 10^8$. Of course, practically it impossible now to calculate v because the effective value of v is defined not only by mean proton energy and by nucleon, cluster and fragment binding energies but also by usually unknown cross sections of all possible reactions for wide energy region – and hence we have used very simplified evaluations. Then we obtain values of a between $(1/1.5)10^8 \text{ years}$ and $(1/2.7)10^8 \text{ years}$. From the result we can see that when $P(t) \rightarrow 0$, for both values of a and also in both cases (with valid and invalid relation (2c)) the real time duration is essentially less than without taking the cosmic radiation into account.

As to the more deep terrestrial layers and the core of the earth, we have to take into account the history of the earth formation. Now there is no unique generally accepted theory or even model of the planet origin. There are two known groups of such models: (1) models where one considers the planet origin from the final cooled pieces of the exploded star or super-nova, (2) models where one considers planets as results of the cosmic dust condensation.

Relative to any model from the first group, if one takes any piece of the terrestrial mass, it is impossible to distinguish the genetically real parent and daughter nuclei from the admixture of the same kinds of nuclei formed in other parts of the cooled and transformed parent stellar piece. Therefore one can approximately suppose that the earth age is the sum of the parent star (or the preceding super-nova) age before exploding and of the consequent age of the formed earth. The last age can be determined also by the methods of the nuclear chronometry but

in different ways inside the earth and on the surface of the earth. Deeply inside the earth one has to consider the consequences of the formation and decay of the excited nuclei-chronometers during the preceding stellar (and super-nova) nucleosynthesis and during subsequent planet cooling in the melted magma (inside the earth). And in the surface layers of the earth (up to the depth of ~ 5 meters) we can consider the influence of the cosmic radiation which was presented above. For both cases it is also necessary to take into account the unknown now initial nonzero quantity of the daughter nuclei in the earth (in the examined earth pieces) from the previous stellar (nucleosynthesis and chronometer-decay-chain) processes.

Relative to any model from the second group, from the very beginning it is necessary to take into account the cosmic dust origin. Hypothetically the cosmic dust was born partially simultaneously with first stars after Big Bang and partially during the star evolution – from the cooled micro-rejections out of stars and super-nova during their perturbations and explosions. And now there is neither a systematic theory of the dust origin, independent from the star origin, nor a systematic theory of the dust condensation $\rightarrow$ clotting into a planet. We can approximately evaluate the mean existence time of the earth beginning from the hypothetical mean instant of the conventional dense clotting of the condensed dust into the planet by the methods of nuclear chronometry if we know the real initial quantities of the parent and the daughter nuclei just in this mean instant. And a nonzero initial quantity of the daughter nuclei always leads to a real diminishment of the evaluation of the decay time – a larger diminishment for a larger initial quantity of the daughter nuclei. Moreover, we have to take into account the constant excitation of radioactive nuclei-chronometers by the cosmic radiation and then, in the case of large masses, also the formation of γ -emission-absorption chains with accompanied multiple excitations of nuclei-chronometers.

4. Conclusions and perspectives. The presented simplified estimations brings to the conclusion that the usual (non-corrected) “nuclear clocks” do really indicate not to the realistic values but to the upper limits of the durations of the α -decay stellar and planet processes and also that the realistic durations of these processes have to be much (several orders) smaller.

As a continuation and extension of the exposed results, we propose a scientific program of the future investigations for students, post-graduate students and young researchers, taking into account

- 1) the chains of the successive decays of every star or terrestrial chronometer,
 - 2) several initial excited states of every star or terrestrial chronometer,
 - 3) joint considering the both α - and β - radioactive decays and finally
 - 4) the possible modifications of processes of the stellar and cosmic nucleo-synthesis.
- And all this can strongly influence on our estimations of the universe age in the direction of the noticeably less values and so can have a new philosophical and theological meaning.

References

1. J.Audouze and S.Vauclair, *An Introduction to Nuclear Astrophysics. The Formation and the Evolution of Matter in the Universe* (Reidel Publish.Comp.) 1980, Ch.VIII.
2. W.A.Fowler, *Rev.Mod.Phys.*, 56 (1984) 149.
3. G.J.Wasserburg, *Rev.Mod.Phys.*, 67 (1995) 805.
4. V.S.Olkhovsky, *Atti dell'Accademia Peloritana dei Pericolanti, Sci. Fis., Mat.e Nat.(Messina)*, LXXVI (1998) 59.
5. V.S.Olkhovsky, *Influence of excited radioactive nuclei for results in large-scale nuclear chronometry*, in: *Proc. of the International Conference of Nuclear Physics at Border Lines* (Messina, Italy 21-24 May 2001), pp.241-247.
6. E. Wefers, F. Bosch, T. Faestermann et al, *Nuclear Phys.*, A626 (1997) 215c.
7. N.S. Krylov and V.A. Fock, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 17 (1947) 93.
8. V.S. Olkhovsky, *Izvestia AN SSSR, ser.fiz.*, 49 (1985)938.
9. V.S. Olkhovsky, N.L. Doroshko and G.A.Prokopets, *Izvestia AN SSSR, ser.fiz.*, 54 (1990)988.
10. V.S. Olkhovsky, *Sov. J. Part. Nucl.*, 15 (1984) 130; V.S. Olkhovsky, *Nukleonika*, 35 (1990) 99.
11. V.S. Olkhovsky, M.E. Dolinska and S.A.Omelchenko, *Central Europ. J. of Phys.*, 4 (2006) 1.
12. M.W. Friedlander, *Cosmic Rays* (Cambridge, MA: Harward University Press) 1989, 160p.; see also references in: *Cosmic Rays*, from: *The Columbia Encyclopedia*, sixth edition, 2007.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 537.8

Михайло Г. Пантелят, канд. фіз.-мат. наук,
Микола Г. Шульженко, д-р техн. наук, проф.

**Чисельний аналіз двовимірних та тривимірних електромагнітних полів
(застосування: ротори крупних синхронних турбогенераторів)**

Розроблено методику скінченноелементного аналізу нестационарних електромагнітних полів струмів зворотної послідовності в роторах синхронних генераторів. Методика використана для розрахунку стану синхронного турбогенератора 300 МВт при короткому замкненні двох фаз та довготривалому несиметричному навантаженні. Досліджено електромагнітні явища в стиках пазових клинів ротора.

Ключові слова: нестационарне електромагнітне поле, комп'ютерне моделювання, метод скінченних елементів, турбогенератор.

Michael G. Pantelyat, PhD,

E-mail: m150462@yahoo.com, shulzh@ipmach.kharkov.ua

Статтю представив к.ф.-м.н. Кондратьєв В.М.

1. Introduction.

Rotor (see Fig. 1) is an important part of a modern synchronous generator [1]. Estimation of the electromagnetic, thermal, vibrative and thermo-strength state of the synchronous turbogenerator rotors at various operational conditions is an actual problem of modern science and technology. A problem of special interest is investigation of processes in turbogenerator rotors during a line-to-line short circuit on two phases of the machine and long-time unbalanced load supply [2]. These operational conditions are characterized by producing a travelling electromagnetic field in the turbogenerator stator and induction of negative sequence currents of twice supply frequency (100 Hz) in the rotor [2]. Eddy currents cause essential losses, non-uniform temperature distribution and local heating of the rotor parts (first of all, heating of wedges which fix the excitation winding in the rotor slots, see Fig. 2, 3). It can result in a number of negative mechanical phenomena, for example ultimate failure of the rotor [1]. This paper devoted to computer simulation of electromagnetic phenomena in turbogenerator rotors at above-mentioned operational conditions. The paper presents the description of the two-dimensional and three-dimensional finite element numerical techniques for above-mentioned problems solution and

Mykola G. Shulzhenko, Dr.-Eng. habil., Prof.

Numerical analysis of electromagnetic fields in 2D and 3D (industrial application: large synchronous turbogenerator rotors)

A finite element technique for computer simulation of transient electromagnetic fields due to negative sequence currents in synchronous generator rotors is developed. The numerical technique is applied to the study of a 300 MW synchronous turbogenerator rotor during a line-to-line short circuit and long-time unbalanced load supply. Electromagnetic phenomena in joints of rotor slot wedges are investigated.

Key Words: transient electromagnetic field, computer simulation, finite element method, turbogenerator.

analysis of obtained numerical results. It will be possible to use obtained results for synchronous generators thermal, vibrative and thermo-strength state estimation.



Fig. 1. Rotor of a synchronous turbogenerator



Fig. 2. Slot wedges in the synchronous generator cross-section

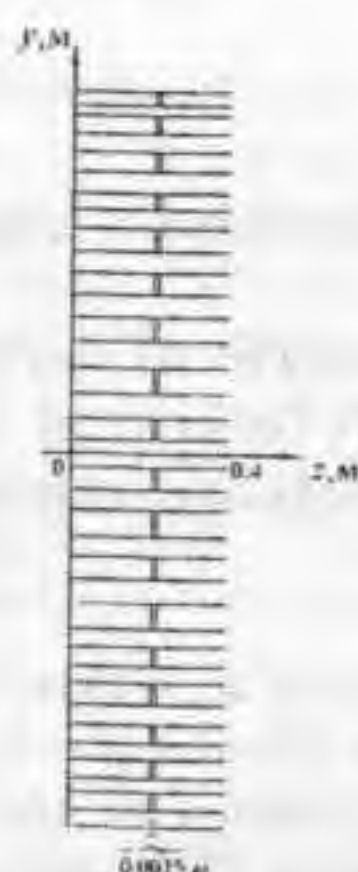


Fig. 3. Considered fragment of the rotor

2. Computational models of the turbogenerator.

Model of a 300 MW turbogenerator rotor under consideration corresponding its actual drawings is presented in Fig. 4, its cross-section – in Fig. 5. The rotor diameter equals 110 cm, the rotor material is steel with electric conductivity $\gamma = 0.5 \cdot 10^7 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$. Closed slots (excluding slots at the big tooth) are filled by copper windings with electric conductivity $\gamma = 6 \cdot 10^7 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$. Non-magnetic slot wedges material (excluding slots at the big tooth) are made from duralumin (electric conductivity $\gamma = 3.33 \cdot 10^7 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$) or titanium ($\gamma = 1.43 \cdot 10^6 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$). Slot wedges at the big tooth (there are no windings inside these slots) are made from the rotor steel ($\gamma = 0.5 \cdot 10^7 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$).

In an additional copper subdomain 2 (see Fig. 5) with $\gamma = 6 \cdot 10^7 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$ representing a simplified model of the stator [3] the travelling wave of negative sequence current density corresponding a line-to-line short circuit on two phases of the machine is given. The air gap between stator and rotor equals 9 cm. The temporal and spatial distributions of the applied negative sequence exciting currents are presented in [3, 4].

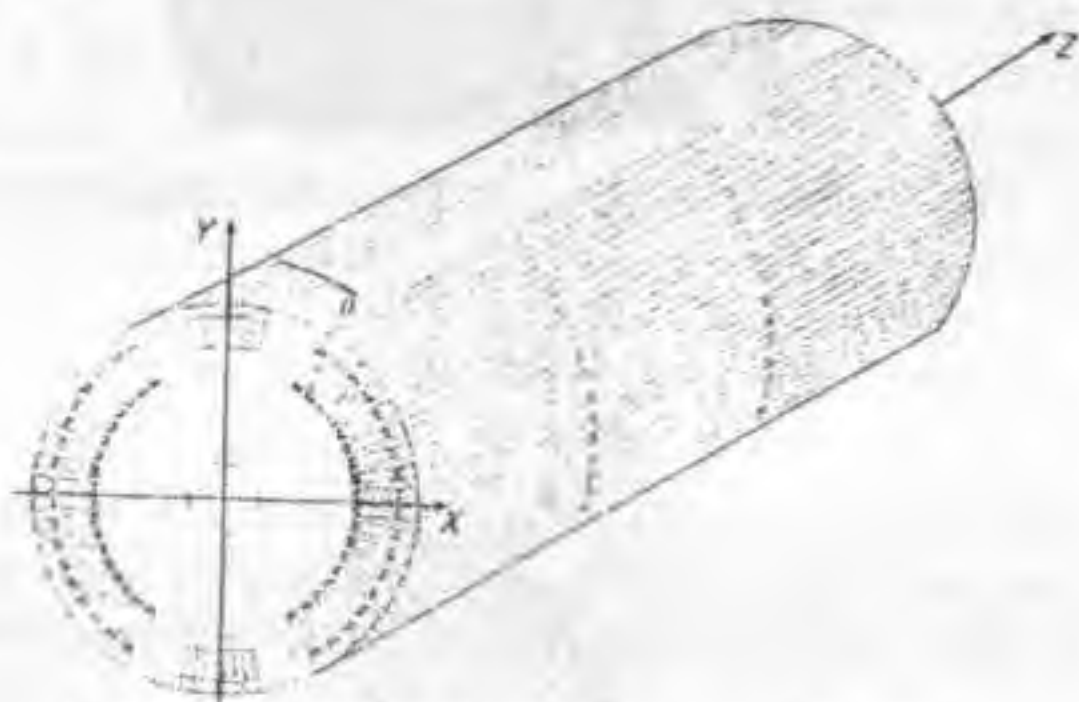


Fig. 4. Design of the 300 MW turbogenerator rotor under consideration

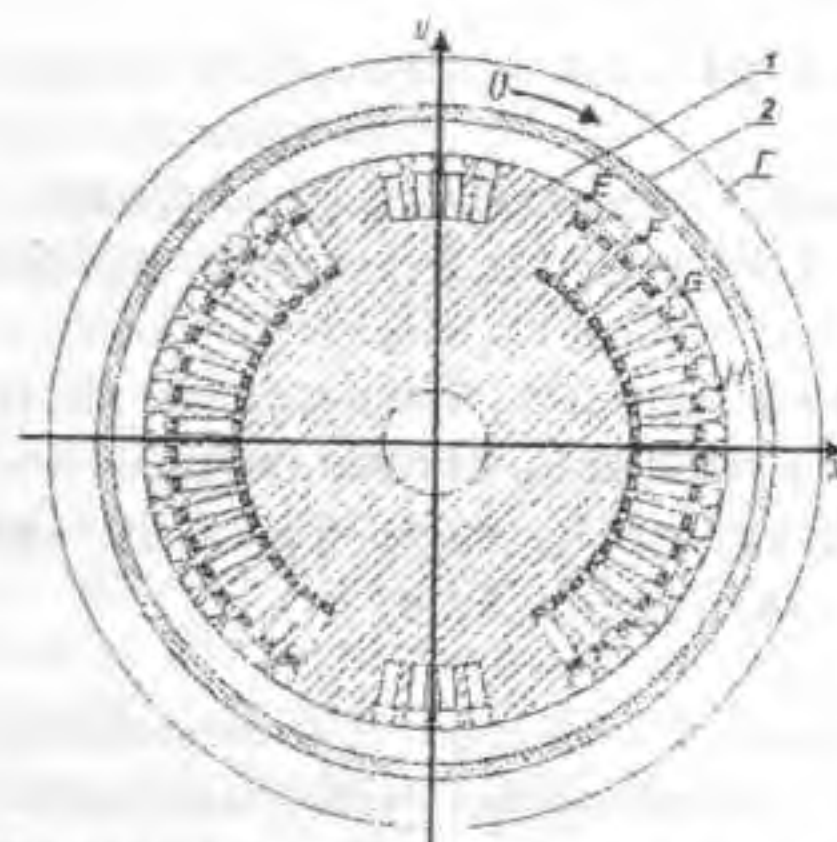


Fig. 5. Cross-section of the turbogenerator computational model: 1 – rotor, 2 – subdomain with given stator current density, Γ – distant bound

3. Governing equations.

The equations relating the various electromagnetic field quantities are constituted by the subset of Maxwell's equations with displacement current neglected (quasi-stationary case) [5]:

$$\begin{aligned} \text{rot} \mathbf{H} &= \mathbf{J}; \\ \text{rot} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \\ \text{div} \mathbf{B} &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

and constitutive relations for material constants [5]:

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}; \mathbf{J} = \gamma \mathbf{E}, \quad (2)$$

where H – magnetic field strength; B – magnetic flux density; E – electric field strength; J – current density; μ – magnetic permeability; γ – electric conductivity. In general magnetic permeability μ may be field-dependent [6, 7]. Magnetic hysteresis and magnetic anisotropy are neglected.

In the general case the whole region of the electromagnetic fields computation can be divided into two subregions [5]:

- subregion Ω_1 with non-zero electrical conductivity and eddy currents (for example, a synchronous turbogenerator rotor);
- subregion without eddy currents Ω_2 , which can contain excitation current density (for example, negative sequence currents in a turbogenerator stator).

The governing equations for negative sequence transient electromagnetic fields with the Coulomb gauge

$$\text{div} \mathbf{A} = 0$$

using magnetic vector potential and scalar electric

potential A , $V - A$ are obtained [5].

The notation A , $V - A$ denotes [5], that for the description of electromagnetic fields in the subregion Ω_1 we use the magnetic vector potential A and scalar electric potential V , and in Ω_2 – magnetic vector potential A . These potentials are introduced in the following way [5]:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \text{rot} \mathbf{A}; \\ \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \text{grad} V. \end{aligned} \quad (3)$$

Finally, governing equations for spatial and temporal distributions of electromagnetic fields to be solved are the following [5]:

$$\begin{aligned} \text{rot} \frac{1}{\mu} \text{rot} \mathbf{A} - \text{grad} \frac{1}{\mu} \text{div} \mathbf{A} + \\ + \gamma \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \gamma \text{grad} V = 0 \end{aligned} \quad \text{in } \Omega_1; \quad (4)$$

$$\text{div} \left(-\gamma \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \gamma \text{grad} V \right) = 0 \quad \text{in } \Omega_1; \quad (5)$$

$$\text{rot} \frac{1}{\mu} \text{rot} \mathbf{A} - \text{grad} \frac{1}{\mu} \text{div} \mathbf{A} = \mathbf{J}_s \quad \text{in } \Omega_2, \quad (6)$$

where $\mathbf{J}_s$ – given excitation current density.

Equations (4) – (6) are solved in 2D and 3D by the finite element method in the Cartesian coordinate system that moves synchronously with the rotor taking into account corresponding boundary conditions [3, 4]. Solution of these equations permits us to determine distributions of eddy currents $\mathbf{J}$ and losses due to negative sequence currents Q [3, 4].

4. Numerical results.

• Influence of the slot wedge material on electromagnetic processes in the rotor

Investigations of the 300 MW synchronous turbogenerator rotor during a line-to-line short circuit and long-time unbalanced load supply are performed (a transient 2D problem) [3]). Detailed information about the rotor design and material properties is presented above.

Distributions of the magnetic vector potential, current density and losses in the rotor with titanium and duralumin slot wedges are obtained. As examples in Fig. 6, 7 losses distributions in the points E , F , G , H of the external rotor surface (see Fig. 5) in the case of the line-to-line short circuit are presented. Current density on the duralumin wedges surface is

in 8.44–10.49 times more than corresponding values in the case of titanium wedges. Losses on the duralumin wedges surface are in 3.22–4.93 times more than on the titanium wedges surface.

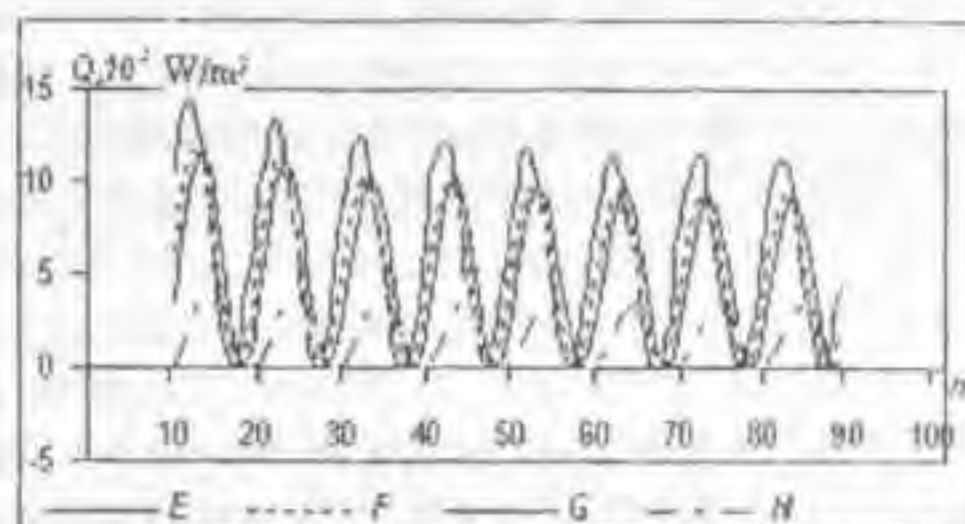


Fig. 6. Losses on the external rotor surface (line-to-line short circuit, titanium wedges)

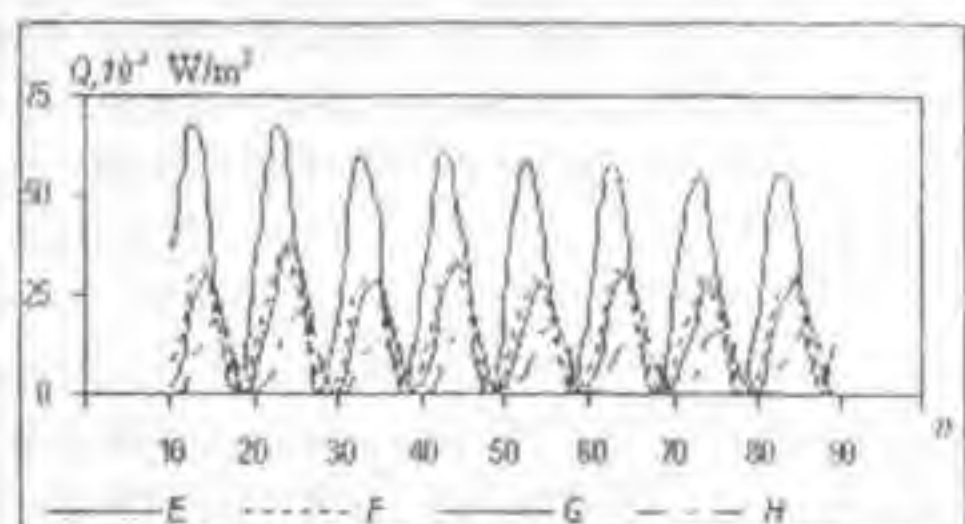


Fig. 7. Losses on the external rotor surface (line-to-line short circuit, duralumin wedges)

In the case of the long-time unbalanced load supply the similar relations between considered quantities take place. Besides, the current density at long-time unbalanced load supply is in 2 orders less than during line-to-line short circuit, and losses – in 4 orders less.

• **influence of the rotor steel's magnetic permeability on eddy currents density and power losses distributions in a 300 MW synchronous turbogenerator rotor during a line-to-line short circuit** is investigated (a transient 3D problem). Model of the rotor under consideration is presented in Fig. 4

In general, the electromagnetic field in the rotor is essentially nonlinear because the magnetic permeability of ferromagnetic materials (first of all, of the rotor steel) depends on the magnetic flux density [6, 7]. To take into account nonlinear magnetic properties of ferromagnetic materials the iterative algorithms [6, 7] should be used. However, even highly effective iterative techniques [6, 7] require at least 4 iterations at each time step of the transient problem that can result in huge computational expenses in 3D. To avoid such a difficulty it is possible to solve a 3D linear problem with correctly given constant quantity of the rotor steel's magnetic permeability. Such an approach [3] permits to obtain relatively

exact numerical results to estimate electromagnetic processes in the turbogenerator rotor and reduce essentially the computational expenses. Here, it is important to investigate the effect of various constant values of the magnetic permeability of rotor steel on eddy currents density and power losses distributions in order to propose recommendation on the correct choice of the rotor's magnetic permeability.

Spatial and temporal distributions of electromagnetic field, eddy current density and losses in the steel rotor for $\mu = 100\mu_0$ and $\mu = \mu_0$ are obtained. As examples Figures 8-11 represent temporal distributions of the axial component of the eddy current density J_z and losses Q in selected points of the rotor. It can be seen that increase of the magnetic permeability from $\mu = \mu_0$ to $\mu = 100\mu_0$ leads to more quick damping of electromagnetic oscillations. Besides, analysis of all numerical results shows that in the case $\mu = 100\mu_0$ the skin-effect within the rotor is more "sharp" (electromagnetic field attenuates quickly) than in the case $\mu = \mu_0$. However, electromagnetic field on the rotor surfaces increases in 1.26–1.56 times (depending on the considered surface point) in the case $\mu = 100\mu_0$ in the comparison with $\mu = \mu_0$ because the field is more "displaced" from the rotor to the air gap when $\mu = 100\mu_0$.

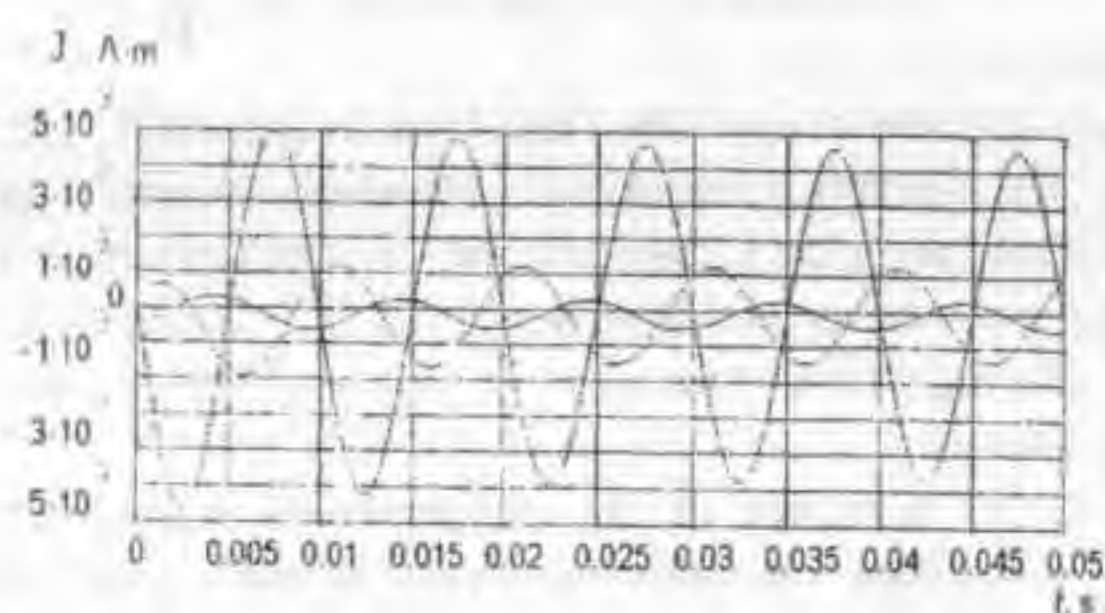


Fig. 8. Axial component J_z of eddy current density, $\mu = \mu_0$

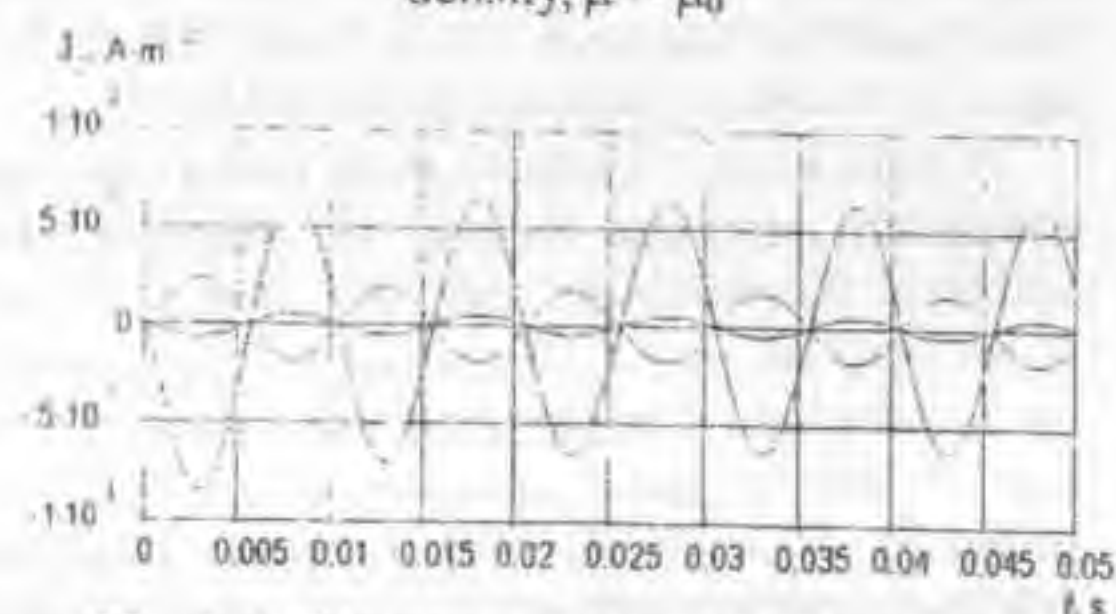


Fig. 9. Axial component J_z of eddy current density, $\mu = 100\mu_0$

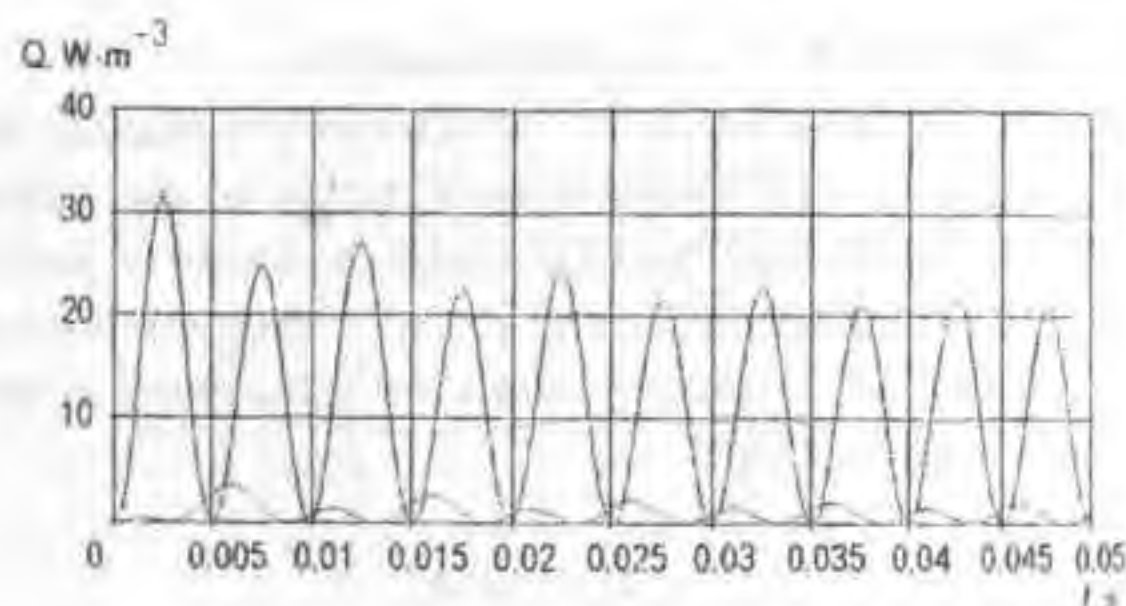


Fig. 10. Losses, $\mu = \mu_0$

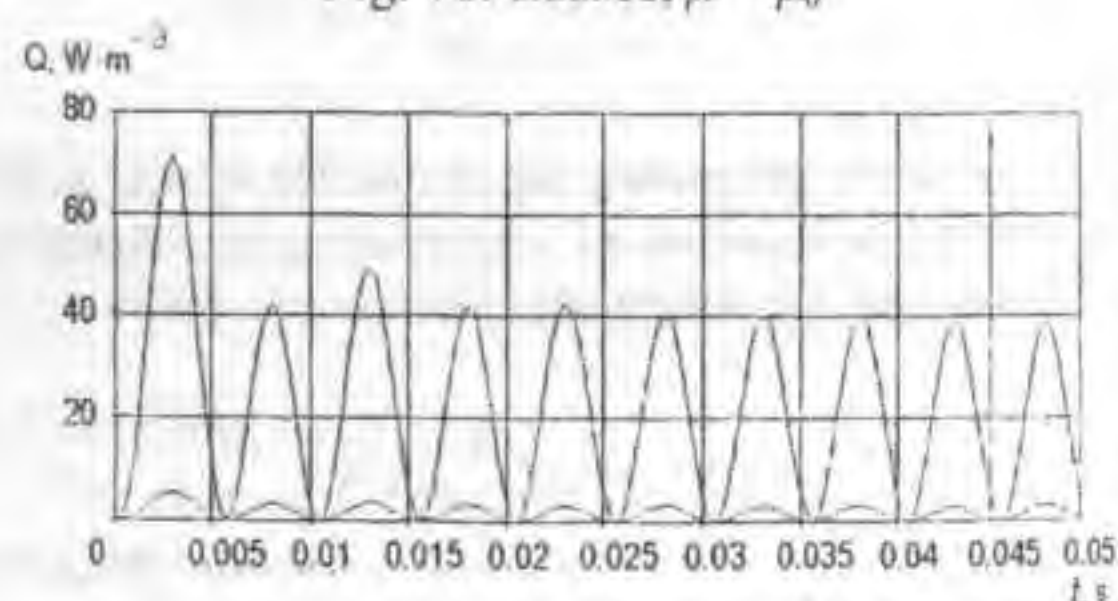


Fig. 11. Losses, $\mu = 100\mu_0$

Regarding losses in the turbogenerator rotor it can be seen that change of the steel's magnetic permeability from $\mu = \mu_0$ to $\mu = 100\mu_0$ results in their essential increase (in 2 times, approximately) within the rotor and on its surface.

Finally, we can assert that the influence of the constant value of the rotor steel's magnetic permeability on the calculated electromagnetic fields, eddy current density and losses is essential. Therefore, correct choice of the mentioned value is important to obtain reliable numerical results. From physical point of view utilization of the average by the magnetization curve value (for example, $\mu = 100\mu_0$) is more correct than magnetic permeability of the saturated steel $\mu = \mu_0$. However, iterative solution of nonlinear problems and development of corresponding effective numerical techniques is still the best way.

• Electromagnetic phenomena in joints of non-magnetic rotor slot wedges

The electromagnetic field in the rotor of a synchronous generator is generally three dimensional. Therefore, this is a problem of great importance to develop a finite element technique and computer code for numerical analysis of 3D transient electromagnetic fields due to negative sequence currents during a line-to-line short circuit in large synchronous turbogenerator rotors. Existing 2D field-computation approaches and software [3] are not able to simulate intrinsically 3D stationary and transient electromagnetic phenomena in turbogenerator rotors. It is impossible to carry out accurate numeri-

cal simulation of 3D transient electromagnetic processes within whole structure of the rotor because of huge computational expenses. Therefore, we have carried out the finite element analysis of electromagnetic fields and losses in important structural parts of the rotor – joints of nonmagnetic slot wedges by the rotor length (see Fig. 3). Obtained numerical results will be used for computer simulation of thermal and mechanical behaviour of the rotor. A model of a whole 300 MW turbogenerator rotor under consideration corresponding its actual drawings is presented in Fig. 4. A considered fragment of the rotor (a region of slot wedges joints, length 40 cm) is shown in Fig. 3. Air gap between joints equals 1.5 mm. Numerical results are obtained as spatial and temporal distributions of eddy current density components and losses in the rotor fragment under consideration. As an example in Fig. 12 spatial distribution of the axial component of the magnetic vector potential A_z along the slot wedge length (stationary problem for the fragment depicted in Fig. 3) is presented.

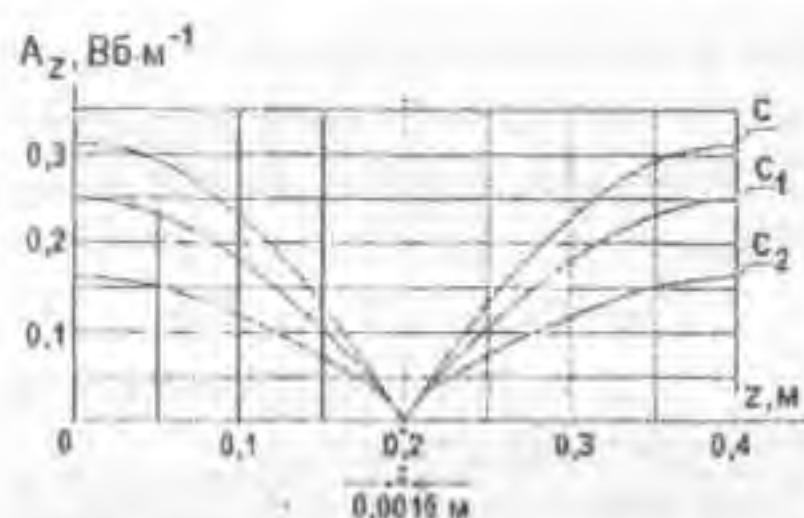


Fig. 12. Magnetic vector potential distribution along the slot wedge length

Effect of the slot wedge material on transient 3D electromagnetic field, eddy current density and losses in the rotor is studied. It is demonstrated that titanium wedges are preferable in comparison with duralumin ones because utilization of titanium wedges results in essential decrease of eddy currents density and losses in the turbogenerator rotor.

5. Conclusion.

At the A.N. Podgorny Institute of Problems in Machinery NASU techniques for the finite element computer simulation of stationary and transient 2D and 3D electromagnetic processes in turbogenerator rotors are developed. Problems of electromagnetic fields and losses calculation in the cross-section and spatial fragments of the turbogenerator 300 MW at various operating conditions are solved. Influence of the slot wedge material on electromagnetic processes in the turbogenerator rotor is investigated. It is demonstrated that titanium wedges are preferable in comparison with duralumin ones because utilization of titanium wedges results in essential decrease of

eddy currents density and losses in the turbogenerator rotor. Influence of the rotor steel's magnetic permeability on eddy currents density and power losses distributions in a 300 MW synchronous turbogenerator rotor in 3D formulation is investigated. Stationary and transient phenomena in joints of nonmagnetic rotor slot wedges are studied.

Obtained numerical results will be used during computer simulation of turbogenerator rotors thermal, thermo-stressed and vibration state as well as for numerical assessment of their life decrease.

References

1. *Khutoretsky G.M., Tokov M.L., Tolvinskaja E.P.*, Turbogenerators design // Leningrad, Energoatomizdat, 1987 (in Russian).
2. *Danilevich Ya.B., Kasharsky E.G.*, Losses in electrical machines // Moscow: GEI, 1963 (in Russian).
3. *Pantelyat M.G., Shulzhenko M.G.*, Finite element analysis of electromagnetic field and losses in a turbogenerator rotor // Proc. of 6-th International Conference on Computational Electromagnetics (CEM'2006), Aachen, Germany, April 2006, pp. 151-152.
4. *Jianyang D., Xubiao L., Feng L., Shiyu Y., Guangzheng N.*, Negative sequence eddy current field analysis of a 1055 MVA turbogenerator by using 3D finite element model // Proc. of 8-th International Conference on Electrical Machines and Systems (ICEMS'2005), Nanjing, China, September 2005, pp. 2075-2078.
5. *Biró O., Preis K.*, On the use of the magnetic vector potential in the finite element analysis of three-dimensional eddy currents // IEEE Transactions on Magnetics (1989) 25, pp. 3145-3159.
6. *Biró O., Preis K., Richter K.R.*, Various FEM formulations for the calculation of transient 3d eddy currents in nonlinear media // IEEE Transactions on Magnetics (1995) 31, pp. 1307-1312.
7. *Pantelyat M.G.*, Numerical analysis of impulse electromagnetic fields in soft ferromagnetic materials // International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics (1999) 19, pp. 185-192.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 511.7

М.В. Працьовитий
О.В. Котова

Про фрактальні властивості деяких
множин канторівського типу,
пов'язаних з Q -зображенням дійсних
чисел

Поводяться результати дослідження
тополого-метричних і фрактальних власти-
востей множин дійсних чисел з обмеження-
ми на вживання символів в їх Q -зображенні
(узагальнення s -адичних розкладів)

Ключові слова: фрактальні властивості,
 Q -зображення.

E-mail: Olga-Kotova@ukr.net

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

Definition 1.1. Let $\Delta_{c_1, \dots, c_k}^3$ be a formal (sym-
bolic) representation of number $x \in [0, 1]$ in
ternary numeration system, $c_i = c_i(x) \in \{0, 1, 2\}$,
i.e.,

$$x \equiv \Delta_{c_1, \dots, c_k}^3 = \sum_{m=1}^{\infty} 3^{-m} c_m.$$

Let $N_i(x, n) = \#\{k : c_k(x) = i, k \leq n\}$ be a
number of digits "i" in ternary expansion of num-
ber x to n -th position inclusive, $i = 0, 1, 2$. If limit
 $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} N_i(x, n) = \nu_i(x)$ exists, then value $\nu_i(x)$
is called the *frequency (or asymptotic frequency)*
of digit "i" in ternary representation of x .

In paper [9], the continuum set of fixed points
of mapping $\eta = \nu_1^3(x)$ where $\nu_1^3(x)$ is a function
of frequency of digit 1 in ternary representation
of x is described. The points of this set have the
following properties:

1. Every fifth ternary digit can be chosen ar-
bitrarily.
2. Other digits are obtained by algorithm and
depend on all previous ternary digits of x .

The Hausdorff-Besicovitch dimension of this
set is found in paper [9].

This motivates our interest in the problem
about fractal properties of the set $M \subset [0, 1]$ con-
sisting of the numbers such that their Q - represen-
tations (generalization of s -adic expansion) have

M.V. Pratsiovytyi
O.V. Kotova

On fractal properties of some Cantor-like
sets related to Q -representation of real
numbers

In the paper, we study topological, metric and
fractal properties of the sets of numbers with con-
ditions on use of digits in their Q -representation
(generalization of s -adic expansions)

Key Words: fractal properties, Q -
representation.

similar structural properties. Namely, we study
the set M with the following properties:

1. Every l -th ($1 < l \in N$) Q -symbol of $x \in M$
is arbitrary.
2. Q -symbol with number $n \notin \{1 + kl\}$,
 $k = 0, 1, 2, \dots$ is determined uniquely and depend
on all previous Q -symbols.

Does dependence of n -th Q -symbol of $x \in M$
on previous Q -symbols influence the Hausdorff-
Besicovitch dimension of the set M ? It is easy to
prove that it does not influence if Q -representation
is at least an s -adic representation. Our paper is
devoted to these and some other problems.

2 s -symbol Q -representation of real num- ber

Let s be a fixed positive integer, $s > 1$, let
 $A = \{0, 1, \dots, s-1\}$, and let $Q = \{q_0, q_1, \dots, q_{s-1}\}$
be a fixed set with the following properties:

$$\begin{cases} 1) & q_i > 0; \\ 2) & q_0 + q_1 + \dots + q_{s-1} = 1 \end{cases} \quad (1)$$

$$\beta_0 = 0, \beta_j = q_0 + q_1 + \dots + q_{j-1}.$$

Theorem 2.1 ([12, p. 87]). For any number $x \in$
 $[0, 1]$ there exists a sequence of numbers $\alpha_k \in A$
such that

$$x = \beta_{\alpha_1} + \sum_{k=2}^{\infty} \left[\beta_{\alpha_k} \prod_{j=1}^{k-1} q_{\alpha_j} \right] \quad (2)$$

For any real number u there exists an expansion

$$u = [u] + \beta_{\alpha_1(u)} + \sum_{k=2}^{\infty} \left[\beta_{\alpha_k(u)} \prod_{j=1}^{k-1} q_{\alpha_j(u)} \right] \quad (3)$$

where $[u]$ is a floor function of u .

Definition 2.1. Representation of the number x (number u) by the series (2) (series (3)) is called the s -symbol Q -expansion.

We denote symbolically expression (2) by $\Delta_{\alpha_1, \alpha_2, \dots}^Q$ and call it by s -symbol Q -representation of x . The number $\alpha_k(x)$ is called the k -th Q -symbol of x .

Remark 1. If $q_i = s^{-1}$, $i = \overline{0, s-1}$, then Q -expansion is an s -adic expansion and Q -representation is a representation of number in numeration system with base s .

Theorem 2.2 ([12]). Any number $x \in [0, 1]$ have no more than two formally different Q -representations. There exist numbers with two different Q -representations, one has period (0), other has period $(s-1)$.

Definition 2.2. Numbers having period 0 in their Q -representations are called the Q -rational, the rest are the Q -irrational.

Any Q -rational number has two different Q -representations, and any Q -irrational number has a unique Q -representation.

The set of all Q -rational numbers is a countable set.

Remark 2. The notion of Q -symbol is well defined for Q -irrational number and is not well defined for Q -rational number. Therefore, we shall give more information in the sequel to avoid ambiguity.

3 Function of frequency of digits of Q -representation

Let $N_i(x, k)$ be a number of symbols " i " in Q -representation of number x to k -th position inclusive. Then limit (if it exists)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} k^{-1} N_i(x, k) = \nu_i(x)$$

is called the frequency of symbol " i " in Q -representation of x .

It is evident that the frequency of Q -symbol does not depend on arbitrary finite amount of symbols of this number.

For Q -rational numbers, the frequency of symbol 0 (or $s-1$) is equal to 1, and the frequencies of the rest symbols are equal to 0.

For any fixed i , function $f(x) = \nu_i(x) = u$ is an everywhere discontinuous function. Moreover, this function takes any value from $[0, 1]$ on the continuum set. Furthermore,

$$E_u = \{x : \nu_i(x) = u\}$$

is a dense set in $[0, 1]$, and its Hausdorff-Besicovitch dimension is equal to

$$\alpha_0(E_u) = \sup_{\{\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_{s-1}\}} \frac{\ln \tau_0^{\tau_0} \tau_1^{\tau_1} \dots \tau_{s-1}^{\tau_{s-1}}}{\ln q_0^{\tau_0} q_1^{\tau_1} \dots q_{s-1}^{\tau_{s-1}}}$$

where $\tau_k > 0$, $\tau_i = u$, $\tau_0 + \tau_1 + \dots + \tau_{s-1} = 1$.

The property W of elements of the set M is called a normal property if almost all elements of M have this property. There exist a few mathematical notions allowing to interpret uniquely words "almost all". The notions of cardinality, measure, Hausdorff-Besicovitch dimension, Baire category are among them. We use the notion of measure of set (Lebesgue measure).

Definition 3.1. The number $x = \Delta_{\alpha_1, \alpha_2, \dots}^Q$ such that the frequency $\nu_i(x)$ of Q -symbol i satisfies the condition

$$\nu_i(x) = q_i \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, s-1\}$$

is called a Q -normal number.

From the following proposition it follows that this definition is well defined.

Theorem 3.1. The Lebesgue measure of all Q -normal numbers from $[0, 1]$ is equal to 1.

Theorem 3.2. Almost all numbers from $[0, 1]$ are normal in any Q -representation with rational $q_0, q_1, \dots, q_{s-1}$.

Definition 3.2. The number $x \in [0, 1]$ is called a non-normal in Q -representation if x does not have frequency for at least one Q -symbol.

Theorem 3.3. The set $V \subset [0, 1]$ of non-normal in Q -representation numbers is a superfractal, i.e., it is a continuum set, and its Hausdorff-Besicovitch dimension is equal to 1.

4 Transition from s -symbol Q -representation to adjusted s^l -symbol $\bar{Q}$ -representation

Let l be a fixed positive integer, $l > 1$, and let $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_l) \in A^l$.

Define a simple function

$$k = \varphi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_l) = \alpha_1 s^{l-1} + \alpha_2 s^{l-2} + \dots + \alpha_l$$

$$\text{and put } \bar{q}_k = \prod_{j=1}^l q_{\alpha_j}.$$

Lemma 1. If the set $Q = \{q_0, \dots, q_{s-1}\}$ satisfies conditions (1), then the set $\bar{Q} = \{\bar{q}_0, \dots, \bar{q}_m\}$, $m = s^l - 1$, also satisfies conditions (1).

Proof. Let $(\alpha_1 \dots \alpha_l)_s$ be an s -adic representation of number $k \in N \cup \{0\}$, i.e.,

$$k = \alpha_1 s^{l-1} + \alpha_2 s^{l-2} + \dots + \alpha_l = (\alpha_1 \dots \alpha_l)_s.$$

Let $\alpha_1 \dots \alpha_l =: \bar{k}$, namely,

$$\underbrace{0 \dots 00}_l = \bar{0},$$

$$\underbrace{0 \dots 01}_l = \bar{1},$$

$$\dots \dots \dots$$

$$\underbrace{(s-1) \dots (s-1)}_l = \bar{m},$$

$$((s-1) \dots (s-1)(s-1))_s =$$

$$\frac{s-1}{1} \left(1 - s^l \right) = s^l - 1 = m.$$

Divide all infinite sequence of Q -symbols of x into blocks consisting of l symbols. Then Q -representation of x can be rewritten formally by infinite ordered set of symbols from the set $\{0, \bar{1}, \dots, \bar{m}\}$. Namely,

$$x = \Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_l}^Q = \Delta_{k_1 \dots k_m}^{\bar{Q}}$$

where $k_1 \equiv (\alpha_1 \dots \alpha_l)_s, \dots$

$$k_{n+1} \equiv (\alpha_{1+nl+1} \dots \alpha_{l+nl+l})_s,$$

$$k_1 = \alpha_1 s^{l-1} + \alpha_2 s^{l-2} + \dots + \alpha_l,$$

$$\bar{Q} = \{\bar{q}_0, \bar{q}_1, \dots, \bar{q}_m\}, \text{ where}$$

$$k_1 = \alpha_1 s^{l-1} + \alpha_2 s^{l-2} + \dots + \alpha_l,$$

$$\bar{q}_k = \prod_{j=1}^l q_{\alpha_j}.$$

$$\text{It is evident that } \begin{cases} \bar{q}_k > 0, \\ \sum_{k=0}^m \bar{q}_k = 1. \end{cases}$$

□

Remark 3. If we have the set Q satisfying (1), by algorithm from Lemma 1, we can construct the new set $\bar{Q}$ satisfying conditions (1). This set defines new representation adjusted with Q -representation of $x \in [0, 1]$.

Let

$$\varphi(x_1, x_2, \dots, x_l) = x_1 s^{l-1} + x_2 s^{l-2} + \dots + x_{l-1} s + x_l.$$

Theorem 4.1. For any $x \in [0, 1]$ the equality holds:

$$x \equiv \Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_m}^Q = \Delta_{k_1 \dots k_m}^{\bar{Q}} \quad (4)$$

where $k_i = \varphi(\alpha_{l(i-1)+1}, \alpha_{l(i-1)+2}, \dots, \alpha_{li})$ for any $i = 1, 2, \dots$

Proof. In fact, α_i takes values from the set A . Then functional φ of l variables takes s^l different values from the set A .

$$\bar{A} = \{0 = \varphi(0, \dots, 0), 1 = \varphi(0, \dots, 0, 1), \dots, s^l - 1 = \varphi(s-1, \dots, s-1)\}.$$

To conclude the proof it is enough to show the equality of cylinders

$$\Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_{lm}}^Q = \Delta_{k_1 \dots k_m}^{\bar{Q}}$$

for any $m \in N$ and sequence $(\alpha_1, \dots, \alpha_{lm})$ where k_i are given by formulae (4).

Using Lemma 1, we get

$$|\Delta_{k_1 \dots k_m}^{\bar{Q}}| = \prod_{j=1}^m \bar{q}_{k_j} = \prod_{i=1}^{lm} q_{\alpha_i} = |\Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_{lm}}^Q|.$$

It remains to prove that

$$\inf \Delta_{k_1 \dots k_m}^{\bar{Q}} = \inf \Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_{lm}}^Q.$$

Indeed,

$$\inf \Delta_{k_1 \dots k_m}^{\bar{Q}} = \Delta_{k_1 \dots k_m(0)}^{\bar{Q}} =$$

$$= \bar{\beta}_{k_1} + \sum_{n=2}^m \left[\bar{\beta}_{k_n} \prod_{j=1}^{n-1} \bar{q}_{k_j} \right] =$$

$$= \beta_{\alpha_1} + \sum_{n=2}^{lm} \left[\beta_{\alpha_n} \prod_{j=1}^{n-1} q_{\alpha_j} \right] = \inf \Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_{lm}}^Q,$$

which proves the theorem. □

□

5 Fractal properties of some Cantor-like sets related to Q -representation of real numbers

1. The set M .

Consider two positive integers $s > 1$, $l > 1$ and a sequence of matrices

$$\|c_{ij}^n\| = \begin{pmatrix} c_{01}^n & c_{02}^n & \dots & c_{0(l-1)}^n \\ c_{11}^n & c_{12}^n & \dots & c_{1(l-1)}^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{(s-1)1}^n & c_{(s-1)2}^n & \dots & c_{(s-1)(l-1)}^n \end{pmatrix}$$

where $n = 1, 2, \dots$, $c_{ij}^n \in A = \{0, 1, \dots, s-1\}$.

Theorem 5.1. *If the sequence $(\|c_{ij}^n\|)_{n=1}^\infty$ is a purely periodic with period*

$$(\|c_{ij}^{n_1+1}\|, \dots, \|c_{ij}^{n_1+2}\|, \dots, \|c_{ij}^{n_1+p}\|),$$

then Hausdorff-Besicovitch dimension of the set

$$M = \{x : x = \Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_k \dots}^Q, \alpha_{1+(n-1)l}(x) \in A, \\ \alpha_{1+(n-1)l+j} = c_{\alpha_{1+(n-1)l} j}^n, j = \overline{1, l-1}\}$$

is a root of the equation

$$\sum_{i_1=0}^{s-1} \dots \sum_{i_p=0}^{s-1} \left(\prod_{k=1}^p \left[q_{i_k} \prod_{j=1}^{l-1} q_{c_{i_k j}^k} \right] \right)^x = 1$$

or

$$\prod_{k=1}^p \sum_{i=0}^{s-1} q_i^x \prod_{j=1}^{l-1} q_{c_{ij}^k}^x = 1. \quad (5)$$

Proof. M is a self-similar set, since for any sequence $(i_1, c_{i_1 0}^1, \dots, c_{i_1 l}^1, \dots, i_p, c_{i_p 0}^p, \dots, c_{i_p l}^p)$ and corresponding cylinder $\Delta_{i_1 c_{i_1 0}^1 \dots c_{i_1 l}^1 \dots i_p c_{i_p 0}^p \dots c_{i_p l}^p}$ the set M is similar to the part of M belonging to this cylinder, namely,

$$M \stackrel{k}{\sim} \left[M \cap \Delta_{i_1 c_{i_1 0}^1 \dots c_{i_1 l}^1 \dots i_p c_{i_p 0}^p \dots c_{i_p l}^p} \right]$$

where similarity ratio is given by formula

$$k = \prod_{k=1}^p \left(q_{i_k} \prod_{j=1}^{l-1} q_{c_{i_k j}^k} \right).$$

Since M is a perfect set (i.e., a closed set without isolated points), self-similar dimension of M coincides with Hausdorff-Besicovitch dimension of M and is a root of equation (5). $\square$

Remark 4. *If the sequence of matrices $(\|c_{ij}^n\|)_{n=1}^\infty$ is periodic but period starts from position $n_1 + 1$, then the theorem remains valid. Then M is not a self-similar set but is a finite union of self-similar sets with the same structure of similarity.*

Corollary 5.1. *If all matrices of sequence $(\|c_{ij}^n\|)_{n=1}^\infty$ are identical, i.e., $c_{ij}^n = c_{ij}$, then the Hausdorff-Besicovitch dimension of M is a root of the equation*

$$\sum_{i=0}^{s-1} \left[q_i \prod_{j=1}^{l-1} q_{c_{ij}} \right]^x = 1.$$

Corollary 5.2. *If*

$$(c_{i1} \dots c_{i(l-1)}) = (c_{01} \dots c_{0(l-1)}), \quad i = \overline{0, s-1},$$

then the Hausdorff-Besicovitch dimension of M is a root of the equation

$$(q_0^x + \dots + q_{s-1}^x) \prod_{j=1}^{l-1} q_{c_{0j}}^x = 1.$$

Corollary 5.3. *If $q_i = \frac{1}{s}$, $i = \overline{0, s-1}$, then the Hausdorff-Besicovitch dimension of the set*

$$M = \{x : x = \Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_k \dots}^Q, \alpha_{1+(n-1)l}(x) \in A, \\ \alpha_{1+(n-1)l+j} = \text{const}_{1+(n-1)l+j}, j = \overline{1, l-1}\}$$

is equal to $\frac{1}{l}$.

2. The set O .

Let (m_n) be an increasing sequence of positive integers such that $m_{n+1} - m_n \geq 2$, $(c_n, c'_n) \in A^2$, $n = 1, 2, \dots$

Theorem 5.2. *The set*

$$O = \{x : x = \Delta_{\alpha_1 \dots \alpha_k \dots}^Q, \\ (\alpha_{m_n}(x), \alpha_{m_{n+1}}(x)) \neq (c_n, c'_{n+1})\}$$

is a nowhere dense perfect set of zero Lebesgue measure.

Proof. 1. For any subinterval (a, b) from $[0, 1]$ there exists cylinder $\nabla_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}$ of some rank k such that it is contained in (a, b) . Then for $m_n > k$,

$$\nabla_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k \dots \alpha_{m_n-1} c_{m_n} c'_{m_n+1}} \cap O = \emptyset.$$

Hence, the set O is a nowhere dense set by definition.

The set O is perfect according to theorem about structure of perfect sets of real numbers [10].

2. Suppose $F_0 = [0, 1]$, F_k is a union of cylinders of rank k for Q -representation such that interior points contains points of the set O , and

$$\bar{F}_{k+1} = F_k \setminus F_{k+1}.$$

Then $\lambda(F_{k+1}) = \lambda(F_k) - \lambda(\bar{F}_{k+1})$, $O \subset F_{k+1} \subset F_k$
 $\forall k \in \mathbb{N}$ and $\lambda(O) \leq \lambda(F_{k+1}) \rightarrow \lambda(O)$ ($n \rightarrow \infty$).

Since

$$\lambda(F_{k+1}) = \frac{\lambda(F_{k+1})}{\lambda(F_k)} \cdot \frac{\lambda(F_k)}{\lambda(F_{k-1})} \cdot \dots \cdot \frac{\lambda(F_1)}{\lambda(F_0)},$$

it follows that

$$\begin{aligned} \lambda(O) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda(F_{k+1}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^n \frac{\lambda(F_k)}{\lambda(F_{k-1})} = \\ &= \prod_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda(F_k)}{\lambda(F_{k-1})} = \prod_{k=1}^{\infty} \left[1 - \frac{\lambda(\bar{F}_k)}{\lambda(F_{k-1})} \right]. \end{aligned}$$

Since $\frac{\lambda(\bar{F}_{k+1})}{\lambda(F_k)} \geq q_{\min}^2 > 0$, the series $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda(\bar{F}_k)}{\lambda(F_{k-1})}$ is divergent, and the last infinite product does so. Thus $\lambda(O) = 0$. $\square$

References

1. Alberverio S., Pratsiomytyi M., Torbin G. Topological and fractal properties of real numbers which are not normal // Bull. Sci. Math. — 2005. — 129, no. 8. — P. 615–630.
2. Alberverio S., Pratsiomytyi M., Torbin G. Singular probability distributions and fractal properties of sets of real numbers defined by the asymptotic frequencies of their s -adic digits // Ukrainian Math. J. — 2005. — 57, no. 9. — P. 1163–1170.
3. Besicovitch A.S. On the sum of digits of real numbers represented in the dyadic number system // Math. Ann. Soc. — 1934. — 110, P. 321–330.
4. Eggleston H.G. The fractional dimension of a set defined by decimal properties // Quart. J. Math. Soc. — 1919. — 20. — P. 31–36.
5. Eggleston H.G. Sets of fractional dimensions which occur in some problems of number theory // Proc. London Math. Soc. — 1951. — 54. — P. 42–93.
6. Olsen L. Applications of multifractal divergence points to sets of numbers defined by their N -adic expansion // Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. — 2004. — 136, no. 1. — P. 139–165.
7. Kotova O.V. Some properties of function of frequency of digit 1 in ternary expansion of real number // Trans. Drahomanov National Pedagogical Univ. Ser. 1, Phys. Math. — Kyiv: Drahomanov National Pedagogical Univ., 2005. — no. 6. — P. 255–260.
8. Kotova O.V. Continuum cardinality of the set of solutions of one class of equations that contain the function of frequency of ternary digits of a number // Ukrainian Math. J. — 2008. — 60, no. 10. — P. 1414–1421.
9. Kotova O.V. Fractality of the set of solutions of one class of equations that contain the function of frequency of ternary digits of a number // Trans. Drahomanov National Pedagogical Univ. Ser. 1, Phys. Math. — Kyiv: Drahomanov National Pedagogical Univ., 2006. — no. 7. — P. 152–159.
10. Natanson I.P. Theory of functions of a real variable. — Moscow: Nauka, 1974. — 480 p.
11. Pratsiomytyi M.V., Torbin G.M. Superfractality of the set of numbers having no frequency of n -adic digits and fractal probability distributions // Ukrainian Math. J. — 1995. — 47, no. 7. — P. 971–975.
12. Pratsiomytyi M.V. Fractal approach to investigations of singular probability distributions. — Kyiv: Drahomanov National Pedagogical Univ., 1998. — 296 p.
13. Torbin G.M. Frequency characteristics of normal numbers in different numeration systems // Fractal analysis and related questions. — Kyiv: Inst. Math. NAN Ukraine — Drahomanov National Pedagogical Univ., 1998. — no. 1. — P. 53–55.
14. Torbin A.P., Pratsiomytyi M.V. Fractal sets, functions, distributions. — Kyiv: Naukova Dumka, 1992. — 208 p.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 512.5, 512.6

М.В. Рассадкіна, к.ф.-м.н.

Про сильну (min, max)-еквівалентність,
часткової множини з інволюцією

У даній роботі ми розглядаємо питання про (min, max)-еквівалентність частково впорядкованих множин з інволюцією.

Ключові слова: (min, max)-еквівалентність, частково впорядкована множина, інволюція.

E-mail: StMar@ukr.net

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

We will consider only finite posets.

Let S be a poset without an element 0. The Tits quadratic form of S is by definition the quadratic form $q_S : \mathbb{Z}^{S \cup 0} \rightarrow \mathbb{Z}$, defined by the equality:

$$q_S(z) = z_0^2 + \sum_{i \in S} z_i^2 + \sum_{i < j, i, j \in S} z_i z_j - z_0 \sum_{i \in S} z_i.$$

Here $\mathbb{Z}$ denotes the set of integral numbers and $\mathbb{Z}^{S \cup 0}$ denotes the set of integer vectors $z = (z_i)$, $i \in S \cup 0$.

This form plays an important role in representation theory. In particular, Yu. A. Drozd [1] proved that a poset S is of finite representation type if and only if its Tits form is weakly positive (i. e. it takes positive values for all nonzero vectors with nonnegative coordinates).

In [2] V. M. Bondarenko introduced a notion of (min, max)-equivalence of poset which in particular played decision role under the describing of all posets with positive Tits form and all critical posets concerning positiveness of the Tits form [3].

2 Definitions

Recall some definitions from [2].

Let S be a poset. By a subposet $X \subseteq S$ we mean a full subposets, i. e. for $x, y \in X$, $x < y$ in X if and only if $x < y$ in S . A subset X of a poset S is said to be *upper* (respectively *lower*) if $x \in X$ whenever $x > y$ (resp. $x < y$) and $y \in S$.

M. V. Rassadkina, PhD.

On a strong (min, max)-equivalence of
posets with involution

In this paper we consider a question on (min, max)-equivalence of partially ordered sets with involution.

Key Words: (min, max)-equivalence, partially ordered set, involution.

The notation $x \not\asymp y$ will mean that elements x and y are incomparable. The set of elements $x \in S$, incomparable (resp. comparable) with a fixed element $a \in S$, will be denoted by $S^{\not\asymp}(a)$ (resp. $S(a)$). For subsets Y and Z of S we will write $Y < Z$ if $y < z$ for any $y \in Y, z \in Z$ (this condition holds if Y or Z is empty). Note that we identify singletons with the elements themselves.

For posets X and Y we write $X =_0 Y$ if X and Y are equal as ordinary sets. If $X =_0 Y$ and $x < y$ in X if and only if $x < y$ in Y , then X and Y are called *equal* as posets.

We continue give definitions from [2].

Define, for a minimal (resp. maximal) element $a \in S$, the poset $S_a^{\uparrow}$ (resp. $S_a^{\downarrow}$) in the following way. $S_a^{\uparrow} =_0 S$ (resp. $S_a^{\downarrow} =_0 S$) and the following conditions hold:

- a is a maximal (resp. minimal) element of $S_a^{\uparrow}$ (resp. $S_a^{\downarrow}$);
- if $x, y \neq a$, then $x < y$ in $S_a^{\uparrow}$ (resp. $S_a^{\downarrow}$) if and only if $x < y$ in S ;
- $a > x$ in $S_a^{\uparrow}$ (resp. $a < x$ in $S_a^{\downarrow}$) if and only if $a \not\asymp x$ in S .

We will write $S_{xy}^{\uparrow\downarrow}$ instead of $(S_x^{\downarrow})_y^{\uparrow}$, $S_{xy}^{\downarrow\uparrow}$ instead of $(S_x^{\uparrow})_y^{\downarrow}$, etc.

Let S and T be posets such that $S =_0 T$. The poset T is called (min, max)-equivalent to the poset S , if T is equal to a poset of the form

$$\bar{S} = S_{x_1 x_2 \dots x_p}^{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_p}, \quad (p \geq 0),$$

where $\varepsilon_i \in \{\uparrow, \downarrow\}$ and for $i \in \{1, \dots, p\}$, x_i is a minimal (resp. maximal) element of $\bar{S}_{i-1} =$

$S_{x_1 x_2 \dots x_{i-1}}^{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_{i-1}}$, if $\varepsilon_i = \uparrow$ (resp. $\varepsilon_i = \downarrow$); for $p = 0$, $\bar{S} = S$. Note that elements $x_1, x_2, \dots, x_p$ are not necessarily different. This relation is an equivalence relation (see [3]).

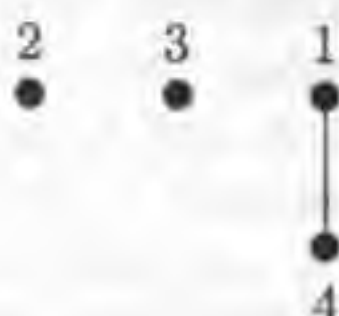
Example 1. If S is equal to



then $T_1 = S_4^{\downarrow}$ has the form



and $T_2 = S_{41}^{\downarrow \uparrow} = (T_1)_1^{\downarrow \uparrow}$ has the form



3 Preliminary results

Here we formulate statements from [3].

Theorem 1. Let S and T be (min,max)-equivalent posets. Then their quadratic Tits forms are equivalent.

Proposition 1. Let T and S be posets. The following conditions are equivalent:

- 1) T is (min, max)-equivalent to S ;
- 2) T is min-equivalent to S ;
- 3) T is max-equivalent to S .

The posets



$\mathcal{K}_4$:



$\mathcal{K}_5$:



are called the Kleiner posets.

This definition is due to the following Kleiner's result: a poset S is of finite representation type if and only if it has no subposets of the form $\mathcal{K}_1 - \mathcal{K}_5$.

Theorem 2. Let S be a P -critical poset (i.e. the Tits form of S is not positive, but the Tits form of any subposet $X \neq S$ is positive). Then it is min-equivalent to some Kleiner poset.

Using this theorem, one can describe all P -critical posets (see [3]). The number of such posets is 75 (up to isomorphism and duality).

4 (Min,max)-equivalent posets with involution

Let $S = (A, *)$ be a poset with involution and let $\sim_*$ denotes the equivalence relation on A induced by the involution $*$ (i. e. $j \sim_* i$ for $i \neq j$ if and only if $j^* = i$). The set of classes of equivalence concerning $\sim_*$ will be denoted by A_* . The symbol i_* , where $i \in A$, will denote the equivalence class which contains i ; if $i^* = i$, then we identify i_* with i . An element $i \in A$ is called small if $|i_*| = 1$, and big if $|i_*| = 2$.

We now give a definition of the Tits quadratic form for posets with involution (see a general definition in [4]).

We give the definition in the form proposed in the paper [5]).

Let $S = (A, *)$ be a poset with involution. Consider first a subsidiary quadratic form $q'_S : \mathbb{Z}^{A \cup 0} \rightarrow \mathbb{Z}$, which defined by the equality:

$$q'_S(z) = z_0^2 + \sum_{i \in A} \varepsilon_i z_i^2 + \sum_{i < j, i, j \in A} z_i z_j - z_0 \sum_{i \in A} z_i,$$

where $\varepsilon_i = 1$, if $i^* = i$, and $\varepsilon_i = \frac{1}{2}$, is $i^* \neq i$ (in the case when ε_i is equal to 1, this form coincides with the Tits form of A).

The Tits quadratic form of $S = (A, *)$ is the quadratic form which is obtained from the form q'_S by identifying z_{i^*} with z_i for all $i \in A$ such that $i^* \neq i$.

Now we generalize the notion of (min, max)-equivalence on posets with involution.

Let $S = (A, *)$ be a poset with involution. Define for a minimal (resp. maximal) small element $a \in A$ a poset S_a^1 (resp. $S_a^{\downarrow}$) in the following way: $S_a^1 = (A_a^1, *_a)$, where $*_a = *$. Let $S = (A, *)$ and $T = (B, \circ)$ be posets with involution such that $A =_0 B$. We will say that $S = (A, *)$ is strongly (min, max)-equivalent to $T = (B, \circ)$ if B is equal to a poset of the form

$$\bar{B} = A_{x_1 x_2 \dots x_p}^{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_p} \quad (p \geq 0),$$

where $\varepsilon_i \in \{\uparrow, \downarrow\}$ and, for $i \in \{1, \dots, p\}$, x_i is a small minimal (resp. small maximal) element of $\bar{A}_{i-1} = A_{x_1 x_2 \dots x_{i-1}}^{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_{i-1}}$ if $\varepsilon_i = \uparrow$ (resp. $\varepsilon_i = \downarrow$); in addition we assume that $* = \circ$. The fact that the strong (min, max)-equivalence is an equivalence relation follows from Corollary 2 [3].

5 Main result

We prove the following theorem.

Theorem 3. The Tits quadratic forms of (min, max)-equivalent posets with involution are equivalent.

Proof. Recall that the poset with involution dual to a poset with involution $S = (A, *)$ is by definition $S^{\text{op}} = (A^{\text{op}}, *)$; in other words, $A^{\text{op}} =_0 A$, $x < y$ in A^{op} iff $x > y$ in A , with the same involution.

Let $S = (A, *)$ and $T = (B, \circ)$ be two strongly (min, max)-equivalent posets with involution. By the definition of such equivalence $\circ = *$. Hence we will write $*$ instead of $\circ$. We must prove that the Tits quadratic form $q_S(z)$ of $S = (A, *)$ is equivalent to the Tits quadratic form $q_T(z)$ of $T = (B, \circ)$. Obviously that it is sufficient to consider the following two cases:

- 1) a is a small minimal element of A and $T = S_a^1$;
- 2) a is a small maximal element of A and $T = S_a^{\downarrow}$.

We consider only the case 1). The case 2) follows from the fact that the case 2) is dual to the case 1), from the equality $(S_a^{\downarrow})^1 = (S^{\text{op}})_a^1$ for any small maximal element and the obvious fact

that dual posets with involution have the same Tits forms.

The fact that, for any $T = S_a^1$ and S , the corresponding Tits forms $q_T(z)$ and $q_S(z)$ are equivalent, follows from the equality $q_S(z) = q_T(z')$, where $z'_0 = z_0 - z_a$, $z'_x = z_x$ for $x \neq a$ and $z'_a = -z_a$. This equality can be proved in the following three steps.

I. We prove the equality for the Tits quadratic forms $q_A(z)$ and $q_B(z')$ of the posets A and B .

II. We prove the equality for quadratic forms $q'_S(z)$ и $q'_T(z')$.

III. Finally we prove the equality for the Tits quadratic forms $q_S(z)$ и $q_T(z')$.

The case I was considered in [3], the case II is considered analogously to the case I (coefficients $1/2$ under $z_x \neq z_0, z_a$ and $z'_x \neq z'_0, z'_a$ does not influence on the proof). Finally, transfer from II to III is obvious since we only identify some z_x and z_y , and z'_x and z'_y , where $z_x, z_y \neq z_0, z_a$ and $z'_x, z'_y \neq z'_0, z'_a$.

6 Conclusions

Thus, in the paper we introduce the notion of strongly (min, max)-equivalent posets with involutions and prove that such posets with involution have equivalent Tits quadratic forms.

1. Drozd Ju. A. Coxeter transformations and representations of partially ordered sets. Funkcional. Anal. i Priloz 8, no. 3, (1974), P. 34–42 (Russian).
2. Bondarenko V. M. On (min, max)-equivalence of posets and applications to the Tits forms. Vi-sn. Kii"v. Uni-v. Ser. Fi-z.-Mat. Nauki, N1, 2005, P. 24–25 (Russian).
3. Bondarenko V. M., Styopochkina M. V. (Min, max)-equivalence of partially ordered sets and Tits quadratic form. Trans. of Institute Of Math. of Ukraine Academy of Sciences, 2, N3, 2005, P.18–58 (Russian).
4. Kleiner M. M., Roiter A. V. Representations of differential graded categories. Matrix problems, Akad. Nauk Ukrain. SSR Inst. Mat., Kiev, 1977, P. 5–70 (Russian).
5. Bondarenko, V. M.; Chebotarev, D. S. On positive-definite Tits forms for unbounded partially ordered sets with involution. Nelinii Koliv. 8, no. 1, 2005, P. 9–17 (Russian).

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 517.927

Н. В. Рева

Неперервність за параметром розв'язків лінійних крайових задач для систем лінійних диференціальних рівнянь за нормою соболевського простору W_1^1 .

Знайдено достатні умови неперервності за параметром розв'язків найбільш загальних лінійних крайових задач для систем лінійних звичайних диференціальних рівнянь першого порядку

Ключові слова: неперервність за параметром, крайові задачі.

E-mail: reva@imath.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

Consider boundary-value problems with parameter $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$ for the systems of the first order linear differential equations

$$y'(t; \varepsilon) = A(t; \varepsilon)y(t; \varepsilon) + f(t; \varepsilon), \quad t \in [a, b], \quad (1)$$

$$U_\varepsilon y(\cdot; \varepsilon) = c_\varepsilon. \quad (2)$$

Here complex matrix-function $A(\cdot, \varepsilon) \in L_1^{m \times m} := L_1([a, b]; \mathbb{C}^{m \times m})$, vector-functions $f(\cdot, \varepsilon) \in L_1^m := L_1([a, b]; \mathbb{C}^m)$, vectors $c_\varepsilon \in \mathbb{C}^m$, $m \in \mathbb{N}$, and linear bounded operators

$$U_\varepsilon : W_1^1([a, b]; \mathbb{C}^m) \rightarrow \mathbb{C}^m \quad (3)$$

are defined by the formula

$$U_\varepsilon y(\cdot; \varepsilon) = \alpha_\varepsilon y(a; \varepsilon) + \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) y'(t; \varepsilon) dt, \quad (4)$$

$$\forall y \in W_1^1([a, b]; \mathbb{C}^m)$$

where matrices $\alpha_\varepsilon \in \mathbb{C}^{m \times m}$, and matrix-function $\Phi(\cdot, \varepsilon) \in L_\infty^{m \times m} := L_\infty([a, b]; \mathbb{C}^{m \times m})$.

The vector-function $y(t; \varepsilon) \in (W_{1,1})^m := W_1^1([a, b]; \mathbb{C}^m)$ is called a solution of the problem (1), (2) if it satisfies system (1) almost everywhere on a finite interval $[a, b]$ and condition (2).

N.V. Reva

Continuous parameter dependence for solutions of the linear boundary-value problems for systems of ordinary differential equations in the Sobolev W_1^1 -norm

The sufficient conditions for the continuous dependence on parameter of the solutions of the most general linear boundary-value problems for systems of first order linear differential equations are established

Key Words: continuous dependence on parameter, boundary-value problems.

If linear operators U_ε may be continued from $(W_1^1)^m$ to the linear bounded operators

$$\tilde{U}_\varepsilon : C([a, b]; \mathbb{C}^m) \rightarrow \mathbb{C}^m, \quad (5)$$

then linear boundary conditions (2) are called *general* (see [1,2] and references therein). These boundary-value problems cover all the classical types of boundary conditions: Cauchy problems, two-point and multipoint, integrated and mixed boundary-value problems (see [3] and references therein). Continuous dependence on parameter of solutions of general boundary problems in the *uniform* norm has been studied earlier in [4, 6, 7]. The results obtained here are conclusive and are close to final

The purpose of this paper is to explore solutions of the problem (1)–(2) with maximal generality, i.e. without the assumption of the existence of continuous extension (4_ε) . However, our results are new even for the conditions of the form (4_ε) , as we establish the continuous dependence on parameter ε in the Sobolev space $(W_1^1)^m$ norm which is stronger than uniform. Therefore, they refine the results obtained in [4, 6, 7].

Let in what follows the following assumption hold.

Assumption $\mathcal{E}$. *Homogeneous problem*

$$y'(t; 0) = A(t; 0)y(t; 0),$$

$$\alpha_0 y(a; 0) + \int_a^b \Phi(t; 0) y'(t; 0) dt = 0,$$

has only trivial solution.

This condition is equivalent to that the limiting non-uniform boundary-value problem

$$y'(t; 0) = A(t; 0)y(t; 0) + f(t; 0), \quad t \in [a, b], \quad (6)$$

$$\alpha_0 y(a; 0) + \int_a^b \Phi(t; 0) y'(t; 0) dt = c_0, \quad (7)$$

has unique solution in the $(W_1^1)^m$ for any vector-function $f(t; 0) \in L_1^m$, and vector $c_0 \in \mathbb{C}^m$.

Theorem 1. Let for problem (5)-(6) the assumption $\mathcal{E}$ and at $\varepsilon \rightarrow +0$ the following conditions

- 1) $\|A(\cdot; \varepsilon) - A(\cdot; 0)\|_1 \rightarrow 0$;
- 2) $\|f(\cdot; \varepsilon) - f(\cdot; 0)\|_1 \rightarrow 0$;
- 3) $c_\varepsilon \rightarrow c_0$;
- 4) $\alpha_\varepsilon \rightarrow \alpha_0$;
- 5) $\|\Phi(\cdot; \varepsilon) - \Phi(\cdot; 0)\|_\infty \rightarrow 0$.

hold. Then $\varepsilon_0 > 0$ exists such that for sufficiently small $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$ problem (1), (2) has unique solution $y(\cdot; \varepsilon)$ satisfying the limiting relation

$$\|y(\cdot; \varepsilon) - y(\cdot; 0)\|_{1,1} \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (8)$$

Remark 1. In the case of initial value problem ($y(a; \varepsilon) = 0$) conditions 1), 2) of the Theorem 1 are not only sufficient, but also necessary.

To prove Theorem 1, we'll apply the following fact.

Lemma 1. If the assumption $\mathcal{E}$ and conditions 1), 4), 5) of Theorem 1 are satisfied, then for sufficiently small $\varepsilon > 0$

$$\det[\alpha_\varepsilon + \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) Y'(t; \varepsilon) dt] \neq 0.$$

Proof. By theorem on homeomorphism [5] from conditions 1) it follows that

$$\|Y(\cdot; \varepsilon) - Y(\cdot; 0)\|_{1,1} \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow +0, \quad (9)$$

and

$$\|Y'(\cdot; \varepsilon) - Y'(\cdot; 0)\|_1 \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (10)$$

Due to conditions 4), 5) and relation (10), we get

$$\begin{aligned} & \|(\alpha_\varepsilon + \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) Y'(t; \varepsilon) dt) - \\ & - (\alpha_0 + \int_a^b \Phi(t; 0) Y'(t; 0) dt)\| \leq \|\alpha_\varepsilon - \alpha_0\| + \\ & + \|\int_a^b \Phi(t; \varepsilon) Y'(t; \varepsilon) dt - \int_a^b \Phi(t; 0) Y'(t; 0) dt\| \leq \\ & \leq \|\alpha_\varepsilon - \alpha_0\| + \\ & + \int_a^b |\Phi(t; \varepsilon) - \Phi(t; 0)| \cdot |Y'(t; \varepsilon)| dt + \\ & + \int_a^b |\Phi(t; 0)| \cdot |Y'(t; \varepsilon) - Y'(t; 0)| dt \leq \\ & \leq \|\alpha_\varepsilon - \alpha_0\| + \|\Phi(t; \varepsilon) - \Phi(t; 0)\|_\infty \cdot \|Y'(t; \varepsilon)\|_1 + \\ & + \|\Phi(t; 0)\|_\infty \cdot \|Y'(t; \varepsilon) - Y'(t; 0)\|_1 \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \end{aligned} \quad (11)$$

Hence due to assumption $\mathcal{E}$

$$\det[\alpha_0 + \int_a^b \Phi(t; 0) Y'(t; 0) dt] \neq 0.$$

Therefore, from (11) it follows that in some neighbourhood of point $\varepsilon = 0$ continuous functions

$$\det[\alpha_\varepsilon + \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) Y'(t; \varepsilon) dt] \neq 0. \quad (12)$$

Proof of Theorem 1. By Lemma 1, from conditions 1), 4), 5) of Theorem 1 it follows that for sufficiently small $\varepsilon > 0$ problem (1), (2) has the unique solution $y(t; \varepsilon)$ such that

$$\begin{aligned} y(t; \varepsilon) &= Y(t; \varepsilon) [\alpha_\varepsilon + \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) Y'(t; \varepsilon) dt]^{-1} \times \\ &\times (c_\varepsilon - \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) [K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]' dt) + K_\varepsilon f(t; \varepsilon), \end{aligned}$$

where

$$K_\varepsilon f(t; \varepsilon) = Y(t; \varepsilon) \int_a^t Y^{-1}(s; \varepsilon) f(s; \varepsilon) ds$$

is solution of the Cauchy problem

$$y'(t; \varepsilon) = A(t; \varepsilon)y(t; \varepsilon) + f(t; \varepsilon), \quad y(a; \varepsilon) = 0.$$

Therefore, by theorem 1 of [7], from conditions 1), 2) of this theorem we have

$$\|K_\varepsilon f(t; \varepsilon) - K_0 f(t; 0)\|_{1,1} \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (13)$$

and

$$\|[K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]' - [K_0 f(t; 0)]'\|_1 \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (14)$$

Since inequality (12) is fulfilled, then from (11) it follows that

$$\begin{aligned} & \|[\alpha_\varepsilon + \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) Y'(t; \varepsilon) dt]^{-1} - \\ & - [\alpha_0 + \int_a^b \Phi(t; 0) Y'(t; 0) dt]^{-1}\| \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Hence, according to the Lemma 1, to prove limiting relation (8), suffices to show that

$$\begin{aligned} & \|(\alpha_\varepsilon - \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) [K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]' dt) - \\ & - (\alpha_0 - \int_a^b \Phi(t; 0) [K_0 f(t; 0)]' dt)\| \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (16)$$

From estimate

$$\begin{aligned} & \|(c_\varepsilon - \int_a^b \Phi(t; \varepsilon) [K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]' dt) - \\ & - (c_0 - \int_a^b \Phi(t; 0) [K_0 f(t; 0)]' dt)\| \leq \\ & \leq \|c_\varepsilon - c_0\| + \|\int_a^b \Phi(t; \varepsilon) \cdot ([K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]' - [K_0 f(t; 0)]') dt\| + \\ & + \|\int_a^b [\Phi(t; \varepsilon) - \Phi(t; 0)] \cdot [K_0 f(t; 0)]' dt\| \leq \\ & \leq \|c_\varepsilon - c_0\| + \int_a^b |\Phi(t; \varepsilon)| \cdot |[K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]' - [K_0 f(t; 0)]'| dt + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \int_a^b |\Phi(t; \varepsilon) - \Phi(t; 0)| \cdot |[K_0 f(t; 0)]'| dt \leq \\ & \leq \|c_\varepsilon - c_0\| + \|\Phi(t; \varepsilon) - \Phi(t; 0)\|_\infty \cdot \|[K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]'\|_1 + \\ & + \|\Phi(t; 0)\|_\infty \cdot \|[K_\varepsilon f(t; \varepsilon)]' - [K_0 f(t; 0)]'\|_1, \end{aligned}$$

applying conditions 3), 5) of Theorem 1 and (14), we obtain (16).

This completes the proof.

References

1. Cole R. H. General boundary conditions for an ordinary linear differential system. Trans. Amer. Math. Soc. – 1964 – V.111 – p. 521-550.
2. Bryan R. N. A linear differential system with general linear boundary conditions. J. Diff. Eq. – 1969 – V.5 – p. 38-48.
3. Kamke E. The directory on the ordinary differential equations. (Russian)– Moscow: Nauka, 1965 – 703 p.
4. Kiguradze I.T. Boundary-value problems for systems of ordinary differential equations.(Russian) Modern problems in mathematics. The latest achievements (Itogi nauki i tekhniki. VINITI Acad. Sci. USSR). – 1987 – V.30 – Moscow – p. 3-103.
5. Mikhailets V. A., Reva N. V. Passage to the limit in linear differential systems.(Russian) – Dopov. Nats. Akad. Nauk Ukr. – 2008 – № 8 – p.28-30.
6. Mikhailets V. A., Reva N. V. Generalization of Kiguradze's theorem on correctness of linear boundary-value problems. (Russian)– Dopov. Nats. Akad. Nauk Ukr. – 2008 – № 9 – p. 23-27.
7. Mikhailets V. A., Reva N. V. Continuous parameter dependence for solutions of the general boundary-value problems.(Russian) – Proc. Inst. Mat. Nats. Akad. Nauk Ukr. – 2008 – V.5, №1 – p. 227-239.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 517.5, 517.98

Н.О. Роженко, кандидат ф.-м. наук.

Пасивні системи опору та стохастичні реалізації стаціонарних процесів

У даній роботі за стохастичною реалізацією регулярного векторного стаціонарного процесу будується відповідна пасивна система опору.

Ключові слова: пасивні системи опору, стохастичні реалізації, клас Каратеодорі.

E-mail: mainatasha@mail.ru

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

In this paper we state the connection between the theory of stochastic realizations ([1], [2]) and the theory of passive impedance systems ([3] – [5]). This connection leads us to a new approach to study stochastic processes, linear stochastic systems and corresponding prediction, filtering, stability problems, both in discrete and continuous time cases. We study stationary regular vector processes with spectral densities which are the boundary values of matrix-functions with bounded Nevanlinna characteristic. Such types of stochastic processes give rise of natural and widely used class of realization models. These models lead to simple recursion estimate algorithms called filters. Specifically the processes with rational spectral densities admit minimal realizations with finite-dimensional state spaces which take on the role of such filters.

2 Dynamical Systems and their Transfer Functions

The Linear Time Invariant Dynamical System with discrete time can be schematically represented as a "black box" X . There is an incoming signal $u(t)$ at the entrance of the system at the moment of time $t = 0, 1, 2, \dots$. And after some processing inside of the "black box" we can observe outgoing signal $y(t)$ at the output of the system.

N.A. Rozhenko, Ph.Dr. Phys. and Math. Sc.

Passive impedance systems and stochastic realizations of stationary processes

By the stochastic realization of regular vector stationary process the corresponding passive impedance system is build.

Key Words: Passive impedance systems, stochastic realizations, the Caratheodory class.

The evolution of such Linear System Σ with discrete time and Hilbert spaces of input and output data U, Y , respectively, and state space X can be described by equations

$$\begin{cases} x(t+1) = Ax(t) + Bu(t), \\ y(t) = Cx(t) + Du(t), \end{cases} \quad (1)$$

where $u(t) \in U, x(t) \in X, y(t) \in Y, t = 0, 1, 2, \dots$. Coefficients A, B, C and D in (1) are linear bounded operators mapping

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}: X \oplus U \longrightarrow X \oplus Y.$$

We denote Linear Dynamical System which is described by the equations (1) as $\Sigma = (A, B, C, D; X, U, Y)$. Linear System $\Sigma^* = (A^*, C^*, B^*, D^*; X, Y, U)$ is said to be conjugate system for Σ .

Function $\theta_\Sigma(z) = D + zC(I - zA)^{-1}B$ is said to be the transfer function of the system $\Sigma = (A, B, C, D; X, U, Y)$. This function is defined on the set of points z of complex plane where bounded operator $(I - zA)^{-1}$ exists. The values of $\theta_\Sigma(z)$ are linear bounded operators mapping from input space U to output space Y .

3 Passive Linear Systems

We devote the most attention to passive linear dynamical systems. System Σ is said to be passive system if for any initial condition $x(0) \in X$ and for any input data $\{u(t)\}_{t=0}^\infty \subset U$ the following

inequality is valid

$$\|x(t+1)\|^2 - \|x(t)\|^2 \leq (\Phi \begin{bmatrix} u(t) \\ y(t) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} u(t) \\ y(t) \end{bmatrix}), \quad (2)$$

where Φ is a "power" operator such that

$$\Phi: U \oplus Y \longrightarrow U \oplus Y, \quad \Phi = \Phi^* = \Phi^{-1}.$$

Inequality (2) is said to be condition of passivity of system Σ and it has the next physical meaning. $\|\cdot\|^2$ is interpreted as energy. Left part of inequality (2) is interpreted as energy variation of internal states at the moment t , right part - as an external energy of the system Σ at the moment t . Condition of passivity (2) means that Σ has no internal energy sources, i.e. system does not produce additional energy but can absorb energy. If in (2) we have equality signs system Σ is conservative. Such a system saves energy.

If system has the "power" operator Φ such that

$$\Phi = \begin{bmatrix} I_U & 0 \\ 0 & -I_Y \end{bmatrix},$$

then Σ is said to be a passive scattering system. For system of this type condition of passivity (2) takes the next form

$$\|x(t+1)\|^2 - \|x(t)\|^2 \leq \|u(t)\|^2 - \|y(t)\|^2. \quad (3)$$

For passive scattering systems input and output data are interpreted as incoming and outgoing waves, respectively. For coefficients of passive scattering system Σ inequality (3) is equivalent to the following condition

$$\begin{bmatrix} A^* & C^* \\ B^* & D^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \leq I_{X \oplus U},$$

i.e. system block operator $\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$ is a contraction, as well as the main operator A . Transfer function $s(z) = D + zC(I - zA)^{-1}B$ of passive scattering system Σ belongs to the Schur class $S(U, Y)$ of analytical in the open unit disk $|z| < 1$ contractive operator functions, i.e. $s(z)^*s(z) \leq I_U$. Linear passive scattering systems were studied in detail in [Arov 1979-2002].

If system Σ has the same input and output spaces $U = Y$ and "power" operator Φ such that

$$\Phi = \begin{bmatrix} 0 & I_U \\ I_U & 0 \end{bmatrix},$$

then Σ is said to be passive impedance system. For system of this type condition of passivity (2) takes the following form

$$\|x(t+1)\|^2 - \|x(t)\|^2 \leq 2\Re(u(t), y(t)). \quad (4)$$

In passive impedance systems voltages are inputs and currents are outputs.

For coefficients of passive impedance system Σ inequality (4) is equivalent to the next condition

$$\begin{bmatrix} I_X - A^*A & C^* - A^*B \\ C - B^*A & D + D^* - B^*B \end{bmatrix} \geq 0. \quad (5)$$

The main operator A of Σ is a contraction. Transfer function $c(z) = D + zC(I - zA)^{-1}B$ of passive impedance system Σ belongs to the Caratheodory class $\ell(U)$ of analytical in the open unit disk $|z| < 1$ operator functions with nonnegative real part: $\Re c(z) \geq 0$.

Lemma 1. Linear system $\Sigma = (A, B, C, D; X, U, U)$ is passive impedance system if and only if its conjugate system $\Sigma^* = (A^*, C^*, B^*, D^*; X, U, U)$ is passive impedance system.

Proof. Condition (5) is equivalent to the following inequality:

$$\begin{bmatrix} I_X & C^* \\ C & D + D^* \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A^* \\ B^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \end{bmatrix} \geq 0,$$

which by the Schur complement method is equivalent to

$$\begin{bmatrix} I_X & C^* & A^* \\ C & D + D^* & B^* \\ A & B & I_X \end{bmatrix} \geq 0.$$

Applying Schur complement to the last inequality we deduce that

$$\begin{bmatrix} I_X & B \\ B^* & D + D^* \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A \\ C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^* & C^* \end{bmatrix} \geq 0,$$

which is equivalent to passivity condition of conjugate system $\Sigma^* = (A^*, C^*, B^*, D^*; X, U, U)$.

In our recent research ([4], [5]) we concentrate our attention on passive impedance systems with transfer functions $c(z)$ such that at least one of the following factorization inequalities

$$\varphi(z)^*\varphi(z) \leq f(z), \quad \psi(z)\psi(z)^* \leq f(z), \quad (6)$$

where $f(z) = 2\Re c(z)$, has a nonzero solution in the classes of analytical in the open unit disk operator

functions. Our main results relate to the bi-stable passive impedance systems where main operator A has the following properties

$$A^n \rightarrow 0 \quad \text{and} \quad (A^*)^n \rightarrow 0 \quad \text{when } n \rightarrow \infty.$$

For the bi-stable passive impedance systems factorization inequalities (6) are solvable. Moreover, for such systems equations

$$\varphi(\zeta)^* \varphi(\zeta) = f(\zeta), \quad \psi(\zeta) \psi(\zeta)^* = f(\zeta)$$

have nonzero solutions a.e. on the unite circle $|\zeta| = 1$, ($f(\zeta) = 2\Re c(\zeta)$).

4 Applications to stochastic realizations

In discrete time case linear stochastic realization model of given stationary regular p -dimensional process $y(t)$ with spectral density $f(z)$ with nonnegative part $c(z)$: $2\Re c(\zeta) = f(\zeta)$ a.e. on $|\zeta| = 1$ has the following form

$$\begin{cases} x_f(t+1) = Ax_f(t) + Ku_f(t), \\ y(t) = Cx_f(t) + Lu_f(t), \end{cases} \quad (7)$$

where $u_f(t)$ is p -dimensional white noise, $x_f(t)$ is n -dimensional state space process, A is a stable matrix of dimension $n \times n$, K , C , L are corresponding dimensional matrices. Stochastic system (7) evolves forward in time t , so that, for each t , $y(t)$ and $x_f(t+1)$ are linear functions of of the past noises $\{u_f(t), u_f(t-1), u_f(t-2), \dots\}$ and consequently uncorrelated to the future noises $\{u_f(t+1), u_f(t+2), \dots\}$. Therefore, vector process $\begin{bmatrix} x_f \\ y \end{bmatrix}$ is stationary in wide sence.

In model (7) u_f and x_f are the parts of solution of the stochastic realization problem of process $y(t)$. They can be chosen in various ways. In [1], [2] the structure of linear stochastic models of form (7) were analyzed completely. Future-past symmetry of a regular invertible process makes possible to develop corresponding backward time models. Such constructions lead to direct and inverse stationary Kalman filtering.

Process $y(t)$ is the output data in model (7). The transfer function of stochastic system (7) $\psi_f(z) = L + zC(I - zA)^{-1}K$, $|z| < 1$, is the spectral factor of the density f of process $y(t)$, i.e.

$$\psi_f(\zeta) \psi_f(\zeta)^* = f(\zeta), \quad \text{a.e.} \quad |\zeta| = 1.$$

Let

$$B = E\{x_f(t+1)y(t)^*\}, \quad D = \frac{1}{2}E\{y(t)y(t)^*\},$$

$$R = E\{x_f(t)x_f(t)^*\},$$

where E means the mathematical expectation.

Theorem 4.1. The linear time invariant dynamical system $\Sigma_{imp} = (\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}; X, \mathbb{C}^p, \mathbb{C}^p)$ with operators $\hat{A} = R^{-1/2}AR^{1/2}$, $\hat{B} = R^{-1/2}B$, $\hat{C} = CR^{1/2}$, $\hat{D} = D$ is passive bi-stable impedance system.

Proof. From the recursions (7) we have

$$0 \leq E\left\{ \begin{bmatrix} x_f(t+1) \\ y(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_f(t+1) \\ y(t) \end{bmatrix}^* \right\} =$$

$$\begin{bmatrix} E\{x_f(t+1)x_f(t+1)^*\} & E\{x_f(t+1)y(t)^*\} \\ E\{y(t)x_f(t+1)^*\} & E\{y(t)y(t)^*\} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} R & B \\ B^* & D + D^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ARA^* + KK^* & ARC^* + KL^* \\ CRA^* + LK^* & CRC^* + LL^* \end{bmatrix}$$

Then $B = ARA^* + KL^*$, and next equality is true:

$$\begin{bmatrix} R - ARA^* & B - ARC^* \\ B^* - CRA^* & D + D^* - CRC^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} KK^* & KL^* \\ LK^* & LL^* \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} K \\ L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K^* & L^* \end{bmatrix}.$$

In other words

$$\begin{aligned} R - ARA^* &= KK^*, \\ B - ARC^* &= KL^*, \\ D + D^* - CRC^* &= LL^*. \end{aligned} \quad (8)$$

Multiplying the first equality in (8) on the $R^{-1/2}$ from the left and from the right and the second one on the $R^{-1/2}$ from the left we'll have

$$I_X - \hat{A}\hat{A}^* = \hat{K}\hat{K}^*, \quad \hat{B} - \hat{A}\hat{C}^* = \hat{K}\hat{L}^*,$$

where $\hat{K} = R^{-1/2}K$ and $\hat{L} = L$. Then third equality in (8) can be rewrite in the form

$$\hat{D} + \hat{D}^* - \hat{C}\hat{C}^* = \hat{L}\hat{L}^*,$$

and

$$\begin{bmatrix} I_X - \hat{A}\hat{A}^* & \hat{B} - \hat{A}\hat{C}^* \\ \hat{B}^* - \hat{C}\hat{A}^* & \hat{D} + \hat{D}^* - \hat{C}\hat{C}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{K}\hat{K}^* & \hat{K}\hat{L}^* \\ \hat{L}\hat{K}^* & \hat{L}\hat{L}^* \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \hat{K} \\ \hat{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{K}^* & \hat{L}^* \end{bmatrix} \geq 0.$$

It means that $\Sigma_{imp}^* = (\hat{A}^*, \hat{C}^*, \hat{B}^*, \hat{D}^*; X, \mathbb{C}^p, \mathbb{C}^p)$ and consequently due to lemma 1 $\Sigma_{imp} =$

$(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}; X, \mathbb{C}^p, \mathbb{C}^p)$ are passive impedance systems.

That fact that Σ_{imp} is bi-stable system follows directly from [1], IV.

System Σ_{imp} is said to be a passive impedance realization of process $y(t)$. This system admits simple way to construct backward realization of $y(t)$ corresponding to stochastic model (7).

Passivity condition of impedance system Σ_{imp} has the form

$$\begin{bmatrix} I_X - \hat{A}^* \hat{A} & \hat{C}^* - \hat{A}^* \hat{B} \\ \hat{C} - \hat{B}^* \hat{A} & \hat{D} + \hat{D}^* - \hat{B}^* \hat{B} \end{bmatrix} \geq 0.$$

Last inequality is true if and only if there exist matrices $\hat{M}$ and $\hat{N}$ such that

$$I_X - \hat{A}^* \hat{A} = \hat{M}^* \hat{M}, \quad \hat{C} - \hat{B}^* \hat{A} = \hat{M}^* \hat{N}, \\ \hat{D} + \hat{D}^* - \hat{B}^* \hat{B} = \hat{N}^* \hat{N}.$$

If $M = \hat{M} R^{-1/2}$, $N = \hat{N}$ then

$$\begin{bmatrix} R^{-1} - A^* R^{-1} A & C^* - A^* R^{-1} B \\ C - B^* R^{-1} A & D + D^* - B^* R^{-1} B \end{bmatrix} = \\ \begin{bmatrix} M^* \\ N^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M & N \end{bmatrix}.$$

If we put $x_b(t) = R^{-1} x_f(t+1)$ we'll get backward stochastic realization model of process $y(t)$ corresponding to model (7):

$$\begin{cases} x_b(t-1) = A^* x_b(t) + M^* u_b(t), \\ y(t) = B^* x_b(t) + N^* u_b(t), \end{cases} \quad (9)$$

(7) with the backward noise $u_b(t)$ and covariation matrix of state process $E\{x_b(t)x_b(t)^*\} = R^{-1}$. The transfer function of stochastic system (9) $\psi_b(z) = N^* + zB^*(I - zA^*)^{-1}M^*$, $|z| > 1$, is the spectral factor of the density f of process $y(t)$:

$$\psi_b(\zeta)\psi_b(\zeta)^* = f(\zeta), \quad \text{a.e. } |\zeta| = 1.$$

Let $S = E\{u_b(t)u_f(t)^*\}$. Then due to [2] we have following stochastic model

$$\begin{cases} x_f(t+1) = Ax_f(t) + Ku_f(t), \\ u_b(t) = Mx_f(t) + Su_f(t), \end{cases}$$

where white noises $u_f(t)$ and $u_b(t)$ are inputs and outputs, respectively, and with transfer function $\alpha(z) = S + zM(I - zA)^{-1}K$.

Next result follows from Theorem 4.1, Theorem 1 and Lemma 3 in [4].

Theorem 4.2. *The linear time invariant dynamical system $\Sigma_{scat} = (\hat{A}, \hat{K}, \hat{M}, \hat{S}; X, \mathbb{C}^m, \mathbb{C}^m)$, where $\hat{K} = R^{-1/2}K$ and $\hat{S} = S$ is conservative scattering system.*

Transfer function $\alpha(z)$ of scattering system Σ_{scat} belongs to the Schur class and has the following properties

$$\alpha(\zeta)\alpha(\zeta)^* = I_m, \quad \psi_b(\zeta)\alpha(\zeta) = \psi_f(\zeta), \quad \text{a.e. } |\zeta| = 1.$$

Minimal and optimal restrictions of passive impedance system Σ_{imp} lead to forward and backward Kalman filters for process $y(t)$.

References

1. Lindquist A. On the structure of state-space models for discrete time stochastic vector processes / A. Lindquist, M. Pavon // IEEE Trans. Auto. Control – 1984. – AC-29 – pp. 418–432
2. Lindquist A. Realization theory for multivariate stationary Gaussian processes / A. Lindquist, G. Picci // SIAM J. Control and Optimization – 1985. – vol 23 – pp. 809–857
3. Arov D.Z. $J_{p,m}$ -inner dilations of matrix-valued functions that belong to the Caratheodory class and admit pseudocontinuation / D.Z. Arov, N.A. Rozhenko // St. Petersburg Mathematical J. – 2008. – vol 19:3. – pp. 375–395
4. Arov D.Z. Passive impedance systems with losses of scattering channels. / D.Z. Arov, N.A. Rozhenko // Ukr. Math. J. – 2007. – vol 59 № 5. – pp. 678–707
5. Arov, D.Z. To the theory of passive systems of resistance with losses of scattering channels / D.Z. Arov, N.A. Rozhenko // Journal of Mathematical Sciences. – 2009. – vol 156, № 5. – pp. 742–760

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 519.21

Т.О. Шалайко, студент КНУ імені Тараса Шевченка
Г.М. Шевченко, доцент КНУ імені Тараса Шевченка

Мультидробовість: сучасний інструмент моделювання складної поведінки

У статті побудовано мультидробовий процес із заданими локальними версіями на нескінченності та у скінченних точках. Обговорюються застосування до фінансової математики.

Ключові слова: Мультидробовий броунівський рух, дробовий броунівський рух, локалізованість.

E-mail: tarasenia@gmail.com, zhora@univ.kiev.ua.

1 Introduction

Brownian motion for a long time has been an extremely popular model for randomness, and still is widely used in simple stochastic models. Its essential feature is independent and stationary increments, which makes it perfect model in many cases, where the future behavior of a process depends only on the current state, but independent of the path which led us to this state. But this is totally inappropriate in situations, where the underlying stochastic processes "remember" their past and, moreover, have the property of long memory (or long-range dependence), which means that the dependence on past behavior is quite strong. Such kind of behavior is frequent in natural phenomena and extremely common in telecommunications and on financial markets. Mathematically the long-range dependence is modeled by the so-called fractional processes, with fractional Brownian motion being the most popular model.

Recently, a new notion was proposed to model a complex behavior: the *multifractionality*. Multifractional processes also have long memory, but, contrary to fractional processes, they can be inhomogeneous in space and time, which makes the area, where they can be applied, much wider.

In this paper we consider particular multifrac-

T.O. Shalaiko, student of Kyiv National Taras Shevchenko University
G.M. Shevchenko, Associate Professor of Kyiv National Taras Shevchenko University

Multifractionality: a modern tool to model complex behaviour

We construct a multifractional process which has prescribed local versions at infinity and at finite points. Applications to financial mathematics are discussed.

Key Words: Multifractional Brownian motion, fractional Brownian motion, localisability.

tional processes, which have the following property: their behavior over a short time period differs significantly from the behavior over a long time. This property is especially important in models of asset prices: usually intraday quotes of a stock are very "rough" and wild, while in a long run the behavior is much smoother.

2 Basic definitions

Let $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ be a complete probability space. In what follows $\stackrel{d}{=}$ denotes the equality in distribution. The symbol C denotes a generic constant which may change from line to line (we will write parameters in its subscript, where the dependence on these parameters is important).

Definition 2.1. Process $\{X_t, t \geq 0\}$ is called α -selfsimilar if for all $\lambda > 0$ holds that $\{X_{\lambda t}, t \geq 0\} \stackrel{d}{=} \{\lambda^\alpha X_t, t \geq 0\}$

The following definitions concern a behavior of a process in small and large scale.

Definition 2.2. A process $\{X_t, t \geq 0\}$ is called α -localisable at the point $t_0 \geq 0$ with a local version $\{Y_t, t \geq 0\}$ if

$$\{\lambda^{-\alpha}(X_{t_0+\lambda s} - X_{t_0}), s \geq 0\} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0+} \{Y_s, s \geq 0\},$$

where the convergence is understood in the sense of convergence of finite-dimensional distributions (fdd). If the latter convergence takes place in the sense of convergence of distributions on the path space, the process X is called strongly localisable.

Definition 2.3. A process $\{X_t, t \geq 0\}$ is called α -localisable at infinity with local version Y if

$$\{\lambda^{-\alpha} X_{\lambda t}, t \geq 0\} \xrightarrow{\lambda \rightarrow \infty} \{Y_t, t \geq 0\}.$$

Remark 2.1. It is easy to see that α -local version of a process at a finite point (or at infinity) is an α -self-similar process. On the other hand, a self-similar process is localisable at infinity and at zero, if, moreover, the process has stationary increments, then it is α -localisable at each finite point as well; and the local versions of this α -self-similar process coincide with the process itself.

Now we turn to a particular self-similar process, the one which probably draws the most attention.

Definition 2.4. A fractional Brownian motion (fBm) on $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ with Hurst index $H \in (0, 1)$ is a centered Gaussian process $B^H = \{B^H(t), t \geq 0\}$ with the covariance function $R_H(t, s) = \mathbb{E} B_t^H B_s^H = \frac{1}{2}(t^{2H} + s^{2H} - |t - s|^{2H})$.

Remark 2.2. It follows straightforwardly from the definition that $B_0^H = 0$ a.s. and $\mathbb{E}(B_t^H - B_s^H)^2 = |t - s|^{2H}$. The last implies that, firstly, B^H has stationary increments, secondly, by the Kolmogorov theorem, it has a continuous modification. So we will assume further that B^H itself has continuous paths and $B_0^H = 0$.

Observe also that due to the relation $R_H(\lambda t, \lambda s) = \lambda^{2H} R(t, s)$, B^H is an H -selfsimilar process.

There are several possibilities to define a multifractional version of fractional Brownian motion. We will use the following definition, which uses the harmonisable representation of fBm.

Definition 2.5. A (harmonisable, normalized) multifractional Brownian motion (mBm) on $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ with Hurst function $H: \mathbb{R}_+ \rightarrow (0, 1)$ is a process $\{B_t^{H(t)}, t \geq 0\}$ which has the following representation:

$$B_t^{H(t)} = G(H(t)) \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{it\xi} - 1}{|\xi|^{H(t)+1/2}} dW_\xi,$$

where $\{W_\xi, \xi \in \mathbb{R}\}$ is a complex rotationally invariant independently scattered Gaussian measure with the control measure equal to the Lebesgue measure and $G(H) = (H\Gamma(2H) \sin \pi H)^{1/2} \pi^{-1/2}$.

Remark 2.3. Perhaps unsurprisingly, fBm is a particular case of mBm with a constant Hurst function $H(t) = H, t \geq 0$ (see e.g. [2]).

Remark 2.4. Throughout this paper we will assume that $H(t)$ is a Hölder continuous function of exponent $\gamma > \sup_{t \geq 0} H(t)$: for all $t, s \geq 0$

$$|H(t) - H(s)| \leq C|t - s|^\gamma.$$

Clearly, mBm is a zero mean Gaussian process. It has the following covariance function:

$$R(B_t^{H(t)}, B_s^{H(s)}) = \frac{G(H(t))G(H(s))}{2G((H(t) + H(s))/2)^2} \times (t^{H(t)+H(s)} + s^{H(t)+H(s)} - |s - t|^{H(t)+H(s)}).$$

The Hölder exponent of a process $X_t = X(t, \omega)$ at point t_0 is defined as $\liminf_{h \rightarrow 0} \frac{\ln|f(t_0+h) - f(t_0)|}{\ln|h|}$.

It holds that if $\gamma > \sup_{t \geq 0} H(t)$ then the Hölder exponent of mBm $\{B_t^{H(t)}, t \geq 0\}$ at every point t_0 is $H(t_0)$ almost surely [1].

As the consequence of the latter property, we see that function $H(t)$ measures the regularity of trajectories of mBm. The closer $H(t)$ is to 1 the "smoother" trajectories of mBm are.

3 Results

Recall that $H(t) \in C^\gamma(\mathbb{R})$, that is, Hölder continuous with exponent $\gamma > \sup_{t \geq 0} H(t)$.

The aim of this section is to construct a process which has prescribed local versions at all finite points and at infinity.

Using the limit invariance of gaussian processes one can prove the following:

Theorem 3.1. The mBm $\{B_t^{H(t)}, t \geq 0\}$ is $H(t_0)$ -localisable at any point $t_0 \geq 0$ with the local version $\{B_s^{H(t_0)}, s \geq 0\}$.

Theorem 3.2. Assume

$$H_\infty > \sup_{t \geq 0} H(t). \quad (1)$$

Then there exists a process $\{X_t, t \geq 0\}$ localisable at any point $t_0 \geq 0$ with the local version $\{B_t^{H(t_0)}, t \geq 0\}$ at this point, localisable at infinity with the local version $\{B_t^{H_\infty}, t \geq 0\}$ at infinity.

Remark 3.1. We cannot avoid the assumption (1). However, its nature is not only a technical need. This condition means that, seen over a long period, a process has much more regular behavior, than over a short time interval. This property is more than usual for price processes on financial markets.

Proof. We will prove that the process $X = \{X_t, t \geq 0\} = \{B_t^{H(t)} + B_t^{H_\infty}, t \geq 0\}$ is as required.

We have

$$\lambda^{-H_\infty} X_{\lambda s} = \lambda^{-H_\infty} (B_{\lambda s}^{H(\lambda s)} + B_{\lambda s}^{H_\infty}).$$

Now observe that $\lambda^{-H_\infty} B_{\lambda s}^{H(\lambda s)} \xrightarrow{P} 0, \lambda \rightarrow 0$, due to Chebyshev's inequality and the following estimate $E \left[\lambda^{-H_\infty} B_{\lambda s}^{H(\lambda s)} \right]^2 = \lambda^{-2H_\infty} (\lambda s)^{2H(\lambda s)} \leq (s^{H_\infty} \vee 1) \lambda^{2(H(\lambda s) - H_\infty)}$. For all $s > 0, \lambda > 0$ $H(\lambda s) < H_\infty$ implies $\lambda^{H(\lambda s) - H_\infty} \rightarrow 0, \lambda \rightarrow \infty$. Hence by Slutsky's theorem and the selfsimilarity of fBm, $\lambda^{-H_\infty} (B_{\lambda s}^{H(\lambda s)} + B_{\lambda s}^{H_\infty}) \xrightarrow{w} B_s^{H_\infty}$. So the local version of $\{X_t, t \geq 0\}$ on the infinity is $\{B_s^{H_\infty}, s \geq 0\}$.

Let $t_0 \geq 0$ be fixed. We are to prove $H(t_0)$ -localisability of X at t_0 . Write

$$\frac{X_{t_0+su} - X_{t_0}}{s^{H(t_0)}} = \frac{B_{t_0+su}^{H(t_0+su)} - B_{t_0}^{H(t_0)}}{s^{H(t_0)}} + \frac{B_{t_0+su}^{H_\infty} - B_{t_0}^{H_\infty}}{s^{H(t_0)}}.$$

Applying the previous theorem to the first term we get as $s \rightarrow 0$

$$\left\{ \frac{B_{t_0+su}^{H(t_0+su)} - B_{t_0}^{H(t_0)}}{s^{H(t_0)}}, u \geq 0 \right\} \xrightarrow{w} \{B_u^{H(t_0)}, u \geq 0\}.$$

The second term converges in probability to zero. As above, we using the explicit form of the covariance of fBm and making some technical transformations we will get:

$$E \left[s^{-H(t_0)} (B_{t_0+su}^{H_\infty} - B_{t_0}^{H_\infty}) \right]^2 = u^{2H_\infty} s^{2H_\infty - 2H(t_0)},$$

which vanishes as $s \rightarrow 0$ since $H_\infty > H(t_0)$. As the result we have that the first term converges weakly to the local version at the t_0 , the second term converges in probability to zero. Applying Slutsky's theorem, we get the required result. $\square$

Let T be any positive real number. Regard $C([0, T])$ as a metric space of continuous functions

with the uniform distance and the correspondent Borel sigma-algebra $\mathcal{B}$. Assume that processes $\{Y_t, t \in [0, T]\}, \{Y_n(t), t \in [0, T]\}_{n \geq 1}$ have continuous trajectories a.s. (sample function of them belong to $C([0, T])$). We will say that sequence of processes $\{Y_n(t), t \in [0, T]\}_{n \geq 1}$ converges to $\{Y_t, t \in [0, T]\}$ weakly in $C([0, T])$ (in the continuous path space) if for every continuous functional f on $C([0, T])$ the distributions of $f(Y_n)$ weakly converge to the distributions $f(Y)$. It is known [3] that this convergence is equivalent to the weak convergence of the correspondent distributions on $\{C([0, T]), \mathcal{B}\}$.

The following result states that we even have a strong localisability.

Theorem 3.3. Assume that $\inf_{t \geq 0} H(t) > 0$ and $H_\infty > \sup_{t \geq 0} H(t)$. Then

$$\{\lambda^{-H_\infty} X_{\lambda t}, t \in [0, T]\} \xrightarrow{\lambda \rightarrow \infty} \{B_t^{H_\infty}, t \in [0, T]\}.$$

weakly in $C([0, T])$ and for any point $t_0 \in [0, T]$

$$\left\{ \frac{X_{t_0+su} - X_{t_0}}{s^{H(t_0)}}, u \in [0, T] \right\} \rightarrow \{B_u^{H(t_0)}, u \in [0, T]\}$$

as $s \rightarrow 0$ weakly in $C([0, T])$.

Proof. We will prove the first statement, the second can be proved similarly.

Clearly, it is enough to check the convergence in the first statement for any sequence $\{\lambda_n, n \geq 1\}$ such that: $\lambda_n \rightarrow \infty, n \rightarrow \infty$

The proof uses the following Prokhorov's criterion of weak convergence.

Lemma 1. Sequence of processes $\{X_n(t), n \geq 1\}$ is weakly convergent in $C([0, T])$ iff

$$\lim_{A \rightarrow \infty} \limsup_{n \rightarrow \infty} P\{|X_n(0)| > A\} = 0 \quad (2a)$$

and for all $\varepsilon > 0$ as $\delta \rightarrow 0$

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} P\left\{ \sup_{|t-s| < \delta} |X_n(t) - X_n(s)| \geq \varepsilon \right\} \rightarrow 0. \quad (2b)$$

It is clear that weak convergence implies convergence of finite dimensional distributions. We have already proved that the finite dimensional distributions converge to the desired limit. So it remains to prove that these processes converge in $C([0, T])$. Condition 1) is obvious. In order to check 2), we use the following result.

Lemma 2 (Garsia–Rodemich–Rumsey). Assume that $f \in C([0, T])$ then for all $p \geq 1$ and $\rho > p^{-1}$ there exists a constant $C_{p,\rho}$ such that for all $s, t \leq z$, $z \in [0, T]$ the following inequality holds

$$\frac{|f(t) - f(s)|^p}{|t - s|^{p\rho-1}} \leq C_{p,\rho} \int_0^z \int_0^z \frac{|f(x) - f(y)|^p}{|x - y|^{p\rho+1}} dx dy.$$

Now in order to check condition 2), write

$$\begin{aligned} P\left\{\sup_{|t_1-t_2|<\delta} \lambda_n^{-H_\infty} |X_{\lambda_n t_1} - X_{\lambda_n t_2}| \geq \varepsilon\right\} &\leq \\ \lambda_n^{-pH_\infty} \varepsilon^{-p} E\left[\sup_{|t_1-t_2|<\delta} |X_{\lambda_n t_1} - X_{\lambda_n t_2}|^p\right] &\leq \\ \lambda_n^{-pH_\infty} \varepsilon^{-p} \delta^{p\rho-1} E\left[\sup_{|t_1-t_2|<\delta} \frac{|X_{\lambda_n t_1} - X_{\lambda_n t_2}|^p}{|\lambda_n t_1 - \lambda_n t_2|^{p\rho-1}}\right], \end{aligned}$$

Applying the Garsia–Rodemich–Rumsey inequality and changing the order of integration we get that the last expression is bounded, up to some unimportant constant, by

$$\frac{\varepsilon^{-p} \delta^{p\rho-1}}{\lambda_n^{p\rho+pH_\infty-1}} \int_0^T \int_0^T E\left[\frac{|X_{\lambda_n x} - X_{\lambda_n y}|^p}{|x - y|^{p\rho+1}}\right] dx dy.$$

Therefore it is sufficiently to prove that the expression

$$\lambda_n^{1-p\rho-pH_\infty} \int_0^T \int_0^T E\left[\frac{|X_{\lambda_n x} - X_{\lambda_n y}|^p}{|x - y|^{p\rho+1}}\right] dx dy \quad (3)$$

is bounded (in n) in order to prove our theorem. Applying Jensen's inequality and writing an explicit form of X , we get the last integral up to constant is less than

$$\begin{aligned} I_1 + I_2 := \int_0^T \int_0^T \frac{E[|B_{\lambda_n x}^{H_\infty} - B_{\lambda_n y}^{H_\infty}|^p]}{|x - y|^{p\rho+1}} dx dy + \\ \int_0^T \int_0^T \frac{E[|B_{\lambda_n x}^{H(\lambda_n x)} - B_{\lambda_n y}^{H(\lambda_n y)}|^p]}{|x - y|^{p\rho+1}} dx dy. \end{aligned}$$

To estimate the both terms, we will use that $E[|\xi|^p] = C_p(\text{var}[\xi])^{p/2}$ for a centered normal variable ξ . So $E[|B_{\lambda_n x}^{H_\infty} - B_{\lambda_n y}^{H_\infty}|^p] = C_p |\lambda_n x - \lambda_n y|^{H_\infty p}$. Thus, whenever $\rho < H_\infty$ and $p > \rho^{-1}$, I_1 is finite $I_1 \leq C_p \lambda^{pH_\infty}$. Now write for some $t, s \geq 0$

$$\begin{aligned} E[|B_t^{H(t)} - B_s^{H(s)}|^2] &\leq \\ 2 \left(E[|B_t^{H(t)} - B_s^{H(t)}|^2] + E[|B_s^{H(t)} - B_s^{H(s)}|^2] \right), \\ E[|B_t^{H(t)} - B_s^{H(t)}|^2] &\leq |t - s|^{2\tilde{H}} \vee |t - s|^{2\hat{H}}, \end{aligned}$$

where $\tilde{H} = \sup_{t \geq 0} H(t)$ and $\hat{H} = \inf_{t \geq 0} H(t)$.

Denote $U_t^H = \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{it\xi} - 1}{|\xi|^{H+1/2}} dW_\xi$. Write

$$\begin{aligned} E[|B_s^{H(t)} - B_s^{H(s)}|^2] &= \\ E[|G(H(t))U_s^{H(t)} - G(H(s))U_s^{H(s)}|^2] &\leq \\ 2E[G(H(t))^2|U_s^{H(t)} - U_s^{H(s)}|^2] + \\ 2E[|U_s^{H(s)}|^2|G(H(t) - G(H(s)))|]. \end{aligned}$$

Further, observe that $G(H)$ is bounded and is uniformly positive on $[\hat{H}, \tilde{H}]$, moreover it has a bounded derivative there, hence $|G(H(t)) - G(H(s))| \leq C|H(t) - H(s)|$, which gives an estimate of the second term in the last inequality. The first term is estimated as follows:

$$\begin{aligned} E[|U_s^{H(t)} - U_s^{H(s)}|^2] &= \\ \int_{\mathbb{R}} |e^{is\xi} - 1|^2 \left(\frac{1}{|\xi|^{H(t)+1/2}} - \frac{1}{|\xi|^{H(s)+1/2}} \right)^2 d\xi &\leq \\ \int_{\mathbb{R}} (4 \wedge s^2 \xi^2) \frac{1}{|\xi|} \left(\frac{1}{|\xi|^{H(t)}} - \frac{1}{|\xi|^{H(s)}} \right)^2 d\xi. \end{aligned}$$

Applying the mean value theorem to the function $g(H) = |\xi|^H$, we can bound the last expression by $4K(s)(H(t) - H(s))^2$, where $K(s)$ is given by

$$\int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{|\xi|} \wedge s^2 |\xi| \right) \ln^2 |\xi| \left(\frac{1}{|\xi|^{2H(t)}} \vee \frac{1}{|\xi|^{2H(s)}} \right) d\xi.$$

For each $\delta > 0$ we have

$$K(s) \leq C_\delta \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{|\xi|} \wedge s^2 |\xi| \right) \left(\frac{1}{|\xi|^{2\hat{H}_\delta}} \vee \frac{1}{|\xi|^{2\tilde{H}_\delta}} \right) d\xi, \quad (4)$$

where $\hat{H}_\delta = \hat{H} - \delta$, $\tilde{H}_\delta = \tilde{H} + \delta$.

For $s \geq 1$ split the integral in (4) into three: $I_1(s)$ from 0 to $1/s$, $I_2(s)$ from $1/s$ to 1 and $I_3(s)$ from 1 to ∞ . It is easily checked that $I_1(s) = C_\delta s^{2\hat{H}_\delta}$, $I_2 \leq C_\delta s^{2\hat{H}_\delta}$, $I_3 = C_\delta$. Hence, $K(s) \leq C_\delta s^{2\hat{H}_\delta}$. Similarly, for $s < 1$ $K(s) \leq C_\delta$.

Finally, using the Hölder continuity and boundedness of H , we get

$$E[|B_s^{H(t)} - B_s^{H(s)}|^2] \leq C_\delta (1 \vee s^{2\hat{H}_\delta}) (1 \wedge |t - s|^{2\gamma}).$$

Combining this with the above estimate for $E[|B_t^{H(t)} - B_s^{H(t)}|^2]$, we arrive to

$$\begin{aligned} E[|B_t^{H(t)} - B_s^{H(s)}|^2] &\leq C_\delta (1 \vee s^{2\hat{H}_\delta}) (1 \wedge |t - s|^{2\gamma}) \\ &+ C(|t - s|^{2\hat{H}} \vee |t - s|^{2\tilde{H}}). \end{aligned}$$

Now use the normality and apply this to I_2 for n big enough (so that $\lambda_n > 1$) and for $\rho < \hat{H}$:

$$\begin{aligned} I_2 &\leq C_{p,\delta} \lambda_n^{p\hat{H}_\delta} \int_0^T \int_0^T \frac{(1 \wedge (\lambda_n |x-y|))^{p\gamma}}{|x-y|^{p\rho+1}} dx dy + \\ &C_{p,\delta} \lambda_n^{p\hat{H}} \int_0^T \int_0^T \frac{(|x-y|^{p\hat{H}} \vee |x-y|^{p\hat{H}})}{|x-y|^{p\rho+1}} dx dy \leq \\ &C_{p,\delta} \lambda_n^{p(\hat{H}_\delta+\rho)} \int_0^T \int_{\mathbb{R}} \frac{(1 \wedge |z|)^{p\gamma}}{|z|^{p\rho+1}} dz dy + C_{p,\rho} \lambda_n^{p\hat{H}} \leq \\ &C_{p,\delta,\rho} \lambda_n^{p(\hat{H}_\delta+\rho)} + C_{p,\rho} \lambda_n^{p\hat{H}}, \end{aligned}$$

where in the first integral we have changed the variable $x = y + z/\lambda_n$.

Finally, putting estimates for I_1, I_2 , into (3), we bound that expression by $C_{p,\delta,\rho} \lambda_n^{1+p\kappa}$, where $\kappa = (\hat{H}_\delta + \rho) \vee H_\infty - \rho - H_\infty$. Now ρ, δ and p at our disposal (the only restrictions are $\rho \in (0, \hat{H})$, $\delta > 0$ and $p > \rho^{-1}$). As long as $\hat{H}_\delta = \hat{H} + \delta$ and $\hat{H} < H_\infty$, it is clear that we can choose ρ and δ so that $\hat{H}_\delta + \rho < H_\infty$ and then take p such that $\rho p > 1$, giving the desired boundedness and thus concluding the proof. $\square$

Prospective applications: limit theorems for occupation integrals

In this section we will briefly discuss the applications of the theorem we proved to one-class problem. Consider the following functional of a random process $\{Y_t, t \geq 0\}$: $I(t) = \int_0^t f(Y_s) ds$, where $f(\cdot)$ satisfies some mild conditions (e.g. is locally Riemann integrable with compact support). Of a particular interest is the behaviour of $I(t)$ at the infinity, more precisely, we aim to investigate the weak limit of $\frac{1}{c(\lambda)} I(\lambda t)$ as $\lambda \rightarrow \infty$, where $c(\lambda)$ is appropriate function of λ . The results of such type one can find e.g. in Boufoussi et al [5]. The proof of such results for $Y = \{Y_t, t \geq 0\}$ is based on localisability of Y and the use of the *occupation formula*

$$\int_0^t f(Y_s) ds = \int_{\mathbb{R}} f(x) \ell_Y(x, [0, t]) dx,$$

where $\ell_Y(x, [0, t])$ is the local time of $\{Y_s, s \geq 0\}$ — amount of time spent by Y_s in the neighbourhood of x as $s \in [0, t]$. So for a process $X = \{X_t, t \geq 0\}$ one can write

$$\frac{I(\lambda t)}{c(\lambda)} = \frac{\lambda^{1-H_\infty}}{c(\lambda)} \int_{\mathbb{R}} f(x) \ell_{\lambda^{-H_\infty} X_\lambda}(x \lambda^{-H_\infty}, [0, t]) dx.$$

If we put $c(\lambda)$ equal $\lambda^{1-H_\infty} \int_{\mathbb{R}} g(x) dx$ (assuming the latter to be non-zero), then, using the strong H_∞ -localisability of X , we can anticipate that

$$\frac{1}{c(\lambda)} I(\lambda t) \xrightarrow[\lambda \rightarrow \infty]{w} \ell_{B^{H_\infty}}(0, [0, t]),$$

where $\ell_{B^{H_\infty}}(0, [0, t])$ is a local time of B^{H_∞} in 0. However, these are just heuristics, but the precise proof of the latter requires more complicated techniques and is a subject of future research.

Conclusion

In this paper we have constructed a multifractional process with a prescribed local versions at infinity and at finite points. Moreover, we have proved that one has a strong localisability, i.e. a weak convergence on a path space of the correspondent processes.

Literature

1. Ayache A. The covariance structure of multifractional Brownian motion, with application to long range dependence/ A. Ayache, S. Cohen, J. Lévy-Vehel // IEEE Int. Conf. Acoust. Speech Signal Process Proc. — Vol. 6. — 2000. — pp. 3810–3813.
2. Coutin L. An introduction to (stochastic) calculus with respect to fractional Brownian motion/ L. Coutin// Séminaire de Probabilités XL (Lecture Notes in Mathematics, 1899). — Berlin: Springer, 2007. — pp. 3–65
3. Billingsley P. Convergence of probability measures/ P. Billingsley. — New York-London-Sydney-Toronto: Wiley, 1968. — xii+253 p
4. Mishura Yu. Stochastic Calculus for Fractional Brownian Motion and Related Processes. (Lecture Notes in Mathematics, 1929.)/ Yu. Mishura. — Berlin: Springer, 2007. — xii+393 p
5. Boufoussi B. Sample path properties of the local time of multifractional Brownian motion/ B. Boufoussi, M. Dozzi, R. Guerbaz// Bernoulli. — Vol. 13, no. 3. — 2007. — pp. 849–867

Надійшла до редколегії 30.04.2010.

УДК 517.9

Г. В. Щепанюк, ІМ НАН України.

Про властивість експоненційного перемішування для сукупності величин, що допускають кластерний розклад.

Для досить загальної схеми кластерних розкладів, що виникає при дослідженні ґратчастих систем рівноважної статистичної механіки із скінченним радіусом взаємодії, доведено, що факт збіжності ряду кластерних розкладів для певної сукупності спостережуваних дозволяє стверджувати, що відповідна гібсова міра виявляє властивість експоненційного перемішування.

Ключові слова: експоненційне перемішування, кластерні розклади.

E-mail: gena@imath.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

The research was partially supported by the Alexander von Humboldt Foundation.

1 Definition of the cluster expansions.

Let V be some countable set, and let $\mathfrak{P}$ denotes some abstract set such that there exists a function $V : \mathfrak{p} \rightarrow 2^V$, where $\mathfrak{p}$ is an arbitrary element of $\mathfrak{P}$.

Definition 1.1. Any non-empty collection of sets is said to be connected if connected is the corresponding graph having these sets as vertices and with ribs connecting those and only those vertices that represent sets with non-empty intersection.

Definition 1.2. We call a cluster any non-empty finite subset $\{p_1, \dots, p_n\}$ of $\mathfrak{P}$ if the set $\{V(p_1), \dots, V(p_n)\}$ is connected in the sense of Definition 1.1.

Definition 1.3. We will say that a cluster "contains" some element of V if it is contained in some of its elements.

The set of all clusters "containing" the elements of a set $X \subseteq V$ will be denoted as $\Gamma(X)$. In the case when $X = V$ we will also write just Γ instead of $\Gamma(V)$.

G. V. Shchepanyuk, IM UNAS.

On the exponential mixing property for the family of quantities that admit cluster expansions

It is shown that for a very general scheme of cluster expansions, appearing in the analysis of lattice systems with finite-range interaction in the framework of equilibrium statistical mechanics, the convergence of the series of cluster expansions imply exponential mixing property for the corresponding Gibbs measure.

Key Words: exponential mixing, cluster expansions

Definition 1.4. For any $n \in \mathbb{N}$ and $X \subseteq V$

$$\mathcal{D}_n(X) := \{ \{\gamma_1, \dots, \gamma_n\} \subset \Gamma(X) \mid U(\gamma_i) \cap U(\gamma_j) = \emptyset \quad \forall \{i, j\} \subset \{1, \dots, n\} \},$$

where for any $\{p_1, \dots, p_n\} \subset \mathfrak{P}$

$$U(\{p_1, \dots, p_n\}) := \bigcup_{i=1}^n V(p_i).$$

Just as in case of $\Gamma(X)$, we will omit X in $\mathcal{D}_n(X)$ if $X = V$.

Definition 1.5. For any $n \in \mathbb{N}$ and $X, Y \subseteq V$

$$\mathcal{G}_n(X, Y) := \{ \gamma \in \mathcal{D}_n(X \cup Y) \mid U(\gamma_i) \cap X \neq \emptyset \text{ for all } i = 1, \dots, n \}.$$

Again, we will omit Y in $\mathcal{G}_n(X, Y)$, that is to write just $\mathcal{G}_n(X)$ instead of $\mathcal{G}_n(X, Y)$ if $Y = V$.

Moreover for any $Y, X \subseteq V$

$$\mathcal{D}_0(X) := \mathcal{G}_0(Y, X) = \{\emptyset\}. \quad (1)$$

Definition 1.6.

$$\bar{\mathcal{D}}(X) := \bigcup_{i=0}^{\infty} \mathcal{D}_i(X), \quad \bar{\mathcal{G}}(X, Y) := \bigcup_{i=0}^{\infty} \mathcal{G}_i(X, Y),$$

$$\mathcal{G}(X, Y) := \bigcup_{i=1}^{\infty} \mathcal{G}_i(X, Y).$$

Definition 1.7. For any $X \subseteq V$

$$\bar{D} := \bar{D}(V), \quad \bar{G}(X) := \bar{G}(X, V)$$

and

$$G(X) := G(X, V).$$

Definition 1.8. For any $\gamma \in \bar{D}$

$$\gamma_i := \{\gamma_i\} \in \mathcal{D}_1, \quad i = 1, \dots, \#\gamma,$$

and

$$\gamma := \bigcup_{i=1}^{\#\gamma} \gamma_i. \quad (2)$$

Definition 1.9. (The main!) We will say that a collection of some quantities $\{\langle f \rangle\}_{f \in \mathfrak{F}}$, where the set $\mathfrak{F}$ is supposed to be closed with respect to the operation of multiplication of its elements, admit cluster expansion, if for any $f \in \mathfrak{F}$ the corresponding quantity $\langle f \rangle$ can be represented in a form of the following absolutely convergent series:

$$\langle f \rangle = \sum_{\gamma \in \bar{G}(\Lambda_f)} K_f(\gamma) \phi(\Lambda_f \cup U(\gamma)), \quad (3)$$

where

- 1) $\{\Lambda_f\}_{f \in \mathfrak{F}}$ is such a set of finite subsets of V that for any $f_1, f_2 \in \mathfrak{F}$

$$\Lambda_{f_1 f_2} = \Lambda_{f_1} \cup \Lambda_{f_2}, \quad (4)$$

- 2) $\{K_f\}_{f \in \mathfrak{F}}$ is such a collection of real- or complex-valued functions on $\bar{D}$ that for any $f_1, f_2 \in \mathfrak{F}$, for which $\Lambda_{f_1} \cap \Lambda_{f_2} = \emptyset$, and any $\gamma \in \bar{G}(\Lambda_{f_1} \cup \Lambda_{f_2})$ such that any of its components γ_i either $U(\gamma_i) \cap \Lambda_{f_1} = \emptyset$ or $U(\gamma_i) \cap \Lambda_{f_2} = \emptyset$,

$$K_{f_1 f_2}(\gamma) = K_{f_1}(\gamma^{(1)}) K_{f_2}(\gamma^{(2)}), \quad (5)$$

where $\gamma^{(1)}$ and $\gamma^{(2)}$ denotes the set of all such clusters from γ that do not "contain" any element from the sets Λ_{f_2} and Λ_{f_1} ,

- 3) for any finite $X \subset V$

$$\phi(X) := \lim_{\Lambda \nearrow V} \frac{Z(\Lambda \setminus X)}{Z(\Lambda)}, \quad (6)$$

where

$$Z(X) := \sum_{\gamma \in \bar{D}(X)} K(\gamma), \quad (7)$$

and K is such a real- or complex-valued function on $\bar{D}$ that for any $\gamma \in \bar{D}$

$$K(\gamma) = \prod_{i=1}^{\#\gamma} K(\gamma_i). \quad (8)$$

Remark 1. Definition 1.9 (to be correct) implicitly demands that the fraction in the right-hand side of (6) be well-defined at least for some sufficiently large $\Lambda \subset V$ and the the corresponding limit at $\Lambda \nearrow V$ exist. As it follows from [1, §§ 1–3, Chapter 3], this is indeed the case (at least for sufficiently small ξ) if the following additional conditions are fulfilled.

2 Additional conditions.

From now on we additionally demand that

- (A) The set V be equipped with a metric ρ and

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \sqrt[r]{b(r)} = c < \infty, \quad (9)$$

where $b(r) := \sup_{v \in V} \#\{u \in V | \rho(v, u) \leq r\}$, $r \in \mathbb{R}_+ := [0, +\infty[$.

- (B) There exist such $\kappa_2, \kappa_3 > 0$ that for any $\gamma \in \Gamma$

$$\#U(\gamma) \geq \kappa_2 \text{diam } U(\gamma), \quad (10)$$

and

$$\#U(\gamma) \geq \kappa_3 \text{per } U(\gamma), \quad (11)$$

where for any non-empty finite set $X \subset V$

$$\text{diam } X := \max_{v, u \in X} \rho(v, u)$$

and

$$\text{per } X := \max_{v, u, w \in X} \{\rho(v, u) + \rho(u, w) + \rho(w, v)\}. \quad (12)$$

- (C) There exist such $D, \delta > 0$ that for any $n \in \mathbb{N}_+ := \{0\} \cup \mathbb{N}$

$$\sup_{x \in V} \#\{\gamma \in \bar{G}(\{x\}) | \#U(\gamma) = n\} \leq D\delta^n. \quad (13)$$

- (D) There exist such positive constants $\{M_f\}_{f \in \mathfrak{F}}$ and ξ that for any $f \in \mathfrak{F}$ and $\gamma \in \bar{D}$

$$|K_f(\gamma)| \leq M_f \xi^{\#U(\gamma)} \quad (14)$$

and

$$|K(\gamma)| \leq \xi^{\#U(\gamma)}. \quad (15)$$

Remark 2. Condition (9) is definitely fulfilled (with $c = 1$) in case when V is some regular periodic lattice with a finite base and is embedded in a finite-dimensional Euclidean space E with its natural metrics ρ because in this case there exists such $R > 0$ that for all $r \in \mathbb{R}_+$

$$b(r) \leq Rr^\nu, \quad (16)$$

where $\nu \in \mathbb{N}$ is the dimension of the Euclidean space E .

Only such kind of lattices naturally appear in physical models of ideal crystals.

Remark 3. Inequality (16), and thus condition (9), are fulfilled even for much wider class of lattices than those appearing in models of ideal crystals: the class of such lattices comprises practically all lattices that naturally appear in models of the condensed matter physics, because inequality (16) demands only that density of the corresponding macro system be well-defined quantity.

The only class of lattices, for which condition (16) do not hold, are the Bethe lattices with coordinational number $\kappa > 2$, but even for such lattices, appearing in some very abstract models of statistical mechanics and not corresponding to any real substance, condition (9) holds with $c = \kappa - 1$.

Remark 4. The exact values of κ_2 and κ_3 , defined in (10) and (11), depend on the geometry of V and the structure of $\{V(p)\}_{p \in \mathbb{P}}$, and thus, should be calculated separately for every model in consideration. It should only be noted that conditions (10) and (11) are fulfilled, for example, in case when

$$0 < d := \sup_{p \in \mathbb{P}} \text{diam } V(p) < \infty,$$

what is usually the case for all cluster expansions appearing in an investigation of the lattice models of equilibrium statistical mechanics with finite range of interaction.

Remark 5. Usually in the cluster expansions ξ is proportional to some small parameter, and thus, could be taken as small as necessary.

3 Exponential mixing property.

Theorem 3.1. (The main!)

Let some collection of quantities $\{\langle f \rangle\}_{f \in \mathfrak{F}}$ admits cluster expansion (in the sense of Definition 1.9), and conditions (A)–(D) be fulfilled.

Then, there exists such positive constant ξ_0 that for any $\xi \in [0, \xi_0]$ and any $f_1, f_2 \in \mathfrak{F}$ for which $\Lambda_{f_1} \cap \Lambda_{f_2} = \emptyset$,

$$|\langle f_1 f_2 \rangle - \langle f_1 \rangle \langle f_2 \rangle| \leq C e^{-\kappa \rho(\Lambda_{f_1}, \Lambda_{f_2})},$$

where κ is some positive constant depending on $\kappa_2, \kappa_3, \delta, D, b(r)$ and ξ , and the constant C can additionally depend on $|\Lambda_{f_1}|, |\Lambda_{f_2}|, M_{f_1}, M_{f_2}$ and $M_{f_1 f_2}$.

4 Applications.

In addition to possible applications in the future, Theorem 3.1 may be applied to the analysis of cluster expansions constructed in [5] and [6] for the case of quantum lattice systems of compact spins to prove the exponential mixing property of the corresponding Gibbs measure.

Being applied to cluster expansions constructed in [7] for the quantum system of interacting unharmonic oscillators, Theorem 3.1 supports the remark therein that from the constructed there series of cluster expansions follows exponential decay of correlations in the corresponding KMS-states.

References

1. Malyshev V. A., Minlos R. A. Random Gibbs fields. The method of cluster expansions. – Moscow: Nauka, 1985. – 288 p.
2. Marder M. P. Condensed Matter Physics. – New York: John Wiley & Sons, Inc., 2000. – 895 p.
3. Chowdhury D., Stauffer D. Principles of Equilibrium Statistical Mechanics. – New York: Wiley-VCH, 2000. – 538 p.
4. Lavis D. A., Bell G. M. Statistical Mechanics of Lattice Systems. Volume I and II. – Berlin: Springer, 1989 and 1999. – 368 and 429 p.
5. Albeverio S., Kondratiev Yu., Minlos R., Shchepanyuk G. Uniqueness problem for quantum lattice systems with compact spins // Lett. Math. Phys. – 2000. – 52, No 3. – P. 185–195.
6. Albeverio S., Kondratiev Yu., Minlos R., Shchepanyuk G. Ground state Euclidean measures for quantum lattice systems with compact spins // Rep. Math. Phys. – 2000. – 45, No 3. – P. 419–429.
7. Minlos R. A., Verbeure A., Zagrebnov V. A. A Quantum crystal model in the light-mass limit: Gibbs states // Rev. Math. Phys. – 2000. – 12, No 7. – P. 981–1032.

Надійшла до редколегії: 30.04.2010

УДК 512.544.6

О. А. Тилишчак, к. ф.-м. н., доцент

Про максимальні уніпотентні підгрупи
повної лінійної групи над
комутативними кільцями

Доведено, що всі максимальні уніпотентні підгрупи повної лінійної групи над кільцем R з одиницею таким, що $R/\text{rad } R$ є скінченною прямою сумою областей Безу, попарно спряжені та описано одну з цих підгруп.

Ключові слова: максимальна уніпотентна підгрупа, силовська p -підгрупа, повна лінійна група.

E-mail: alxtlk@tn.uz.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

Malcev [1] (see also [2], [3]) has shown that in the general linear group $GL(n, F)$ of degree n over field F any maximal unipotent subgroup (maximal group of unipotent matrices) of this group is conjugated to unitriangular group $UT(n, F)$ of degree n over same field. Here and bellow, unipotent matrix means square matrix A over arbitrary commutative ring R with identity if $A - E$ be a nilpotent matrix, and E be an identity matrix of appropriate order over the ring R . It is mean that any Sylow p -subgroup of the general linear group over field of characteristic p is conjugated to appropriate unitriangular group. Sylow p -subgroups of the general linear group $GL(n, F)$ over arbitrary field F have been classified up to conjugacy in [4]–[7].

Gudlivok, Pogorilyak and Rud'ko [8], [9] have shown that unitriangular group $UT(n, L)$ is a Sylow p -subgroup of the general linear group $GL(n, L)$ over integral domain L of characteristic p , and if L be a principle ideal domain all Sylow p -subgroup of group $GL(n, L)$ conjugated to $UT(n, L)$. From [10] follows that group of all square matrices of order n that after reduction modulo prime radical $\text{rad } R$ of ring R belong to $UT(n, R/\text{rad } R)$ will be a maximal unipotent

A. A. Tylyshchak, PhD, Associate Professor

On maximal unipotent subgroups of the
general linear group over commutative
rings¹

It was proved that all maximal unipotent subgroups of the general linear group over commutative ring R with identity such that $R/\text{rad } R$ be a finite direct sum of Bezou domain are pairwise conjugated, and described one of this groups.

Key Words: maximal unipotent subgroup, Sylow p -subgroup, general linear group.

subgroup of group $GL(n, R)$ if R be a commutative ring with identity, and will be a Sylow p -subgroup of the group $GL(n, R)$ if R be a commutative ring of characteristic p^s (p be a prime, $s \in \mathbb{N}$). In [10] also marking up clear when all Sylow p -subgroup of the group $GL(n, R)$ over commutative local ring R of characteristic p^s are pairwise conjugated.

The papers deals with sufficient condition of pairwise conjugating of maximal unipotent subgroup of the general linear group over commutative ring with identity.

2 On maximal unipotent subgroups of the general linear group over some commutative rings

Let R be a commutative ring with identity, $\hat{T}(n, R)$ be a set of upper triangular matrices of order n over ring R with zeros on main diagonal. We will call commutative integral domain with identity by Bezou ring, if any finitely generated its ideal is a principle ideal.

Theorem 1. *Let R be a Bezou domain. Any maximal unipotent subgroup of group $GL(n, R)$ is conjugated to $UT(n, R)$.*

Proof. Let F be a field of fraction of ring R , and P be a maximal unipotent subgroup of the group $GL(n, R)$. Obviously P is an unipotent

¹The research was supported by Visiting Research Fellowship at the Central European University

subgroup of group $GL(n, F)$, and, so, is contained in some maximal unipotent subgroup of group $GL(n, F)$. From [1] follows that for some matrix $C \in GL(n, F)$ $C^{-1}PC \subset UT(n, F)$. Then first column of the matrix $C^{-1}AC$, and of the matrix AC is equal to zero if $E+A$ be an arbitrary matrix in group P , and E be an identity matrix of order n . Let

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

be the first column of matrix C ($x_i \in R$, $i = 1, \dots, n$). Let $x_i = ax_i^{(0)}$, and $a \in F$ ($x_i^{(0)} \in R$, $i = 1, \dots, n$). Then $X = aX^{(0)}$ if

$$X^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ \vdots \\ x_n^{(0)} \end{pmatrix}$$

Obviously $X^{(0)} \neq 0$, $a \neq 0$, and for any matrix $E+A \in P$ $AX = AX^{(0)} = 0$.

Let

$$X^{(k)} = \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

contains at least k zeros ($0 \leq k < n-1$). We will show that for same matrix $D \in GL(n, R)$ $DX^{(k)}$ contains at least $k+1$ zeros. If $X^{(k)}$ does not contain at least $k+1$ zeros, then it contains at least too non-zero elements. We can assume that $x_1^{(k)} \neq 0$, $x_2^{(k)} \neq 0$. Let $x_1^{(k)}R + x_2^{(k)}R = xR$ ($x \in R$). Let α , β , γ and δ be an element of ring R , that $x_1^{(k)}\alpha + x_2^{(k)}\beta = x$, $x_1^{(k)} = \gamma x$, and $x_2^{(k)} = \delta x$. Its easy to see that $x(\alpha\gamma + \beta\delta) = x$, $x(\gamma x_2^{(k)} - \delta x_1^{(k)}) = 0$. It follows that $\alpha\gamma + \beta\delta = 1$, $\gamma x_2^{(k)} - \delta x_1^{(k)} = 0$. Since

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\delta & \gamma \end{pmatrix} \in GL(2, R),$$

$$M \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\delta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Thus,

$$X^{(k+1)} = \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} X^{(k)}$$

contain at least $k+1$ zeros.

It follows from induction that for some matrix $D' \in GL(n, R)$

$$D'X^{(0)} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

($\varepsilon \in R$). It is easy to see that $\varepsilon \neq 0$, and $X^{(0)} = \varepsilon Y$ if Y be a first column of matrix $S = D'^{-1}$. Since $AX^{(0)} = AY = 0$, the first columns of matrices AS , and $S^{-1}AS$ are equal to zero for any matrix $E+A \in P$, where A be a square matrix of order n over ring R . So, all of matrix of group $S^{-1}PS$ looks as

$$\begin{pmatrix} 1 & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ 0 & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}$$

($\alpha_{ij} \in R$; $i = 1, \dots, n$; $j = 2, \dots, n$).

One can shown by non-difficult induction on n that P is conjugated to $UT(n, R)$. $\square$

Corollary 1. Let R be a commutative ring with identity. If $R/\text{rad } R$ be a Bezou domain, then any maximal unipotent subgroups of group $GL(n, R)$ conjugated to group of all square matrices of order n that after reduction modulo $\text{rad } R$ belong to $UT(n, R/\text{rad } R)$.

Proof. Let φ by the epimorphism $GL(n, R)$ to $GL(n, R/\text{rad } R)$ generated by canonical epimorphism R to $R/\text{rad } R$. It easy to see that for any square matrices A of order n over ring R if $\varphi(A) = 0$, then A is nilpotent. Moreover, A is an unipotent matrix if and only if $\varphi(A)$ is an unipotent matrix. Therefore, the compleat inverse of a maximal unipotent subgroups of the group $GL(n, R/\text{rad } R)$ is a maximal unipotent subgroups of the group $GL(n, R)$. All maximal unipotent subgroups of the group $GL(n, R)$ are pairwise conjugated because all maximal unipotent subgroups of the group $GL(n, R/\text{rad } R)$ are pairwise conjugated. $\square$

Theorem 2. *Let R be a commutative ring with identity. If $R/\text{rad } R$ be a finite direct sum of Bezou domain, then any maximal unipotent subgroups of group $GL(n, R)$ conjugated to group of all square matrices of order n that after reduction modulo $\text{rad } R$ belong to $UT(n, R/\text{rad } R)$.*

Proof. It is easy to see that we can assume that $\text{rad } R = \{0\}$. It is clear that $R = e_1 R \oplus \dots \oplus e_k R$ with primitive idempotents e_i of ring R ($i = 1, \dots, k$). We have respectively

$$GL(n, R) = GL(n, e_1 R) \otimes \dots \otimes GL(n, e_k R) \quad (1)$$

be the direct product of group $GL(n, e_i R)$ ($i = 1, \dots, k$). It is obvious that any maximal unipotent subgroup P of the group $GL(n, R)$ respectively to (1) can be represented by a form $P = P_1 \otimes \dots \otimes P_k$ with maximal unipotent subgroup P_i of the group $GL(n, e_i R)$ ($i = 1, \dots, k$), and subgroup P of the group $GL(n, R)$ is conjugated to $UT(n, R)$ if subgroup P_i of group $GL(n, e_i R)$ is conjugated to $UT(n, e_i R)$ ($i = 1, \dots, k$). It follows from theorem 1 that any maximal unipotent subgroup of the group $GL(n, e_i R)$ conjugated to $UT(n, e_i R)$ ($i = 1, \dots, k$). Therefore, any maximal unipotent subgroup of group $GL(n, R)$ conjugated to $UT(n, R)$. $\square$

3 On Sylow p -subgroups of the general linear group over some commutative ring of characteristic p^s

Theorem 3. *Let R be a commutative ring of characteristic p^s . If $R/\text{rad } R$ be a finite direct sum of Bezou domain, then any Sylow p -subgroups of the group $GL(n, R)$ conjugated to the group of all square matrices of order n that after reduction modulo $\text{rad } R$ belong to $UT(n, R/\text{rad } R)$.*

Proof. It is easy to see that any matrix A of order n over ring R is a p -element of $GL(n, R)$ if and only if A be an unipotent matrix. It is mean that any Sylow p -subgroup of the group $GL(n, R)$ is a maximal unipotent subgroup of the group $GL(n, R)$.

and conjugated to the group of all square matrices of order n that after reduction modulo $\text{rad } R$ belong to $UT(n, R/\text{rad } R)$ $\square$

List of references

1. Malcev A. I. *On some classes infinite solvable groups*. Math. Z., **28** (1951), 567–588.
2. Kolchin E. R. *On certain concepts in the theory of algebraic matrix groups*. Ann. of Math., **49** (1948), 774–789.
3. Suprunenko D. A. *Thoo theorems about matrix group*. Dokl. AN BSSR, **8** (1964), 491–494.
4. Suprunenko D. A. *The liner p -groups*. Dokl. AN BSSR, **4** (1960), 233–235.
5. Vol'vachev R. T. *Sylow p -subgroup of the general linear group*. Izv. AN SSSR. Ser. Mat., **27** (1963), 1031–1054.
6. Konyukh V. S. *On linear p -groups*. Izv. AN BSSR. Ser. Fiz.-Mat. nauk., **1** (1987), 3–8.
7. Leedham-Green C. R., Plesken W. *Some remarks of Sylow subgroups of general linear groups*. Math. Z., **191** (1986), 529–535.
8. Gudivok P. M., Pogorilyak E. Ya. *On modular representations of finite groups over integral domains*. Trudy Mat. Inst. Akad. Nauk SSSR., **183** (1990), 78–86.
9. Gudivok P. M., Rud'ko V. P. *On Sylow subgroups of the general linear group over integral domains*. Dopovidi NAN Ukraini, **8** (1995), 5–7.
10. Tylyshchak A. A. *On Sylow p -subgroups of the general linear group over commutative local ring of characteristic p^s* . Naukovyj Visnyk Uzhgorodskykogo Universytetu. Ser. Mat. and Inform., **5** (2000), 95–102.

Надійшла до редакції 30.04.2010

УДК 511.33

С.П. Варбанець, асистент

Зважена функція дільників над $\mathbb{Z}[i]$

У даній роботі розглядається функція дільників над кільцем цілих гаусових чисел, яка зважена нормою сумою Клоостерман. Побудована асимптотична формула відповідної суматорної функції.

Ключові слова: функція дільників, норменна сума Клоостермана, Z -функція Геке.

E-mail: varb@sana.od.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

Let $\mathbb{Z}[i] = \{a + bi \mid a, b \in \mathbb{Z}, i^2 = -1\}$ means the ring of the Gaussian integer numbers; $\mathbb{Z}[q, i]$ or $\mathbb{Z}[q]$ (respectively, $\mathbb{Z}^*[q, i]$ or $\mathbb{Z}^*[q]$) denotes the complete (respectively, reduced) system of residues modulo q in $\mathbb{Z}[i]$ or $\mathbb{Z}$.

In [3] we introduced and studied the norm Kloosterman sum over $\mathbb{Z}[i]$ which defined by the equality

$$\tilde{K}(\alpha, \beta; q) = \sum_{\substack{x, y \in \mathbb{Z}^*[q, i] \\ N(x, y) \equiv 1 \pmod{q}}} e^{2\pi i \Re \frac{\alpha x + \beta y}{q}},$$

where α, β are fixed numbers from $\mathbb{Z}[i]$, $N(z)$ is a norm z , $N(z) := |z|^2$, $\Re(z)$ is a real part of z .

The classical Kloosterman sums over $\mathbb{Z}[i]$ apply for investigation of distribution of values of the arithmetic functions over $\mathbb{Z}[i]$ (in particular, divisor function of the Gaussian integer numbers) and for construction of estimates for moments of the Hecke Z -function (see, [1]). In [1] the norm Kloosterman sums have been used for the construction of an asymptotic formula for summatory function of the number of divisors of the Gaussian integers with norms in an arithmetic progression.

In this paper we study the sum of values of the divisor function $\tau(\omega)$ ($\omega \in \mathbb{Z}[i]$), which weighted by the norm Kloosterman sum $\tilde{K}(\alpha_0, \omega; q)$.

We prove the following theorem

Theorem 1. Let $q \in \mathbb{N}$, $\alpha_0 \in \mathbb{Z}[i]$, $(\alpha_0, q)_{\mathbb{N}} = 1$ and let τ_{ω} is the divisor function over $\mathbb{Z}[i]$. Then

S.P. Varbanets. Associate professor

The weighting divisor function over $\mathbb{Z}[i]$

In this paper we consider the divisor function over the ring of Gaussian integer numbers weighted by the norm Kloosterman sum. Constructed an asymptotic formula for respective summatory function.

Key Words: divisor function, norm Kloosterman sum, Hecke zeta-function.

the following asymptotic formula

$$\sum_{\substack{\omega \in \mathbb{Z}[i] \\ N(\omega) \leq x}} \tau(\omega) \tilde{K}(\alpha_0, \omega) q = A(q, \alpha_0) x \log x + B(q, \alpha_0) x + O(x^{\frac{1}{2} + \varepsilon} q^{\frac{1}{2}})$$

where $A(q)$ and $B(q)$ are computable constants, holds.

2 Preliminary results

First, some notations. We shall denote by $\bar{\varphi}$ the Euler function in $\mathbb{Z}[i]$; $\tau(\omega)$ means a number of distinct divisors of $\omega \in \mathbb{Z}[i]$; $\mu(n)$ is the Möbius function; $e(x) := \exp(2\pi i x)$; $(\alpha, \beta) = \gcd(\alpha, \beta)$; for $\alpha \in \mathbb{Z}[i]$, $q \in \mathbb{N}$ we stand $(\alpha, q)_{\mathbb{N}}$ for the largest natural d such that $\alpha = d\alpha_0$, $q = dq_0$, $(\alpha_0, q_0)_{\mathbb{N}} = 1$. Also, the Vinogradov symbol as in $f(x) \ll g(x)$ means that $f(x) = O(g(x))$.

To establish our result, we will need the following lemmas.

Lemma 1. Let $q \in \mathbb{N}$, $q = q_1 q_2$, $(q_1, q_2) = 1$. For every $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}[i]$ we have

$$\tilde{K}(\alpha, \beta; q) = \tilde{K}(\alpha, \beta_1 q_2^3, q_1) \cdot \tilde{K}(\alpha, \beta_2 q_1^3, q_2),$$

where β_1, β_2 define from the congruence

$$\beta_1 q_2^2 + \beta_2 q_1^2 \equiv \beta \pmod{q}$$

Lemma 2. Let $\alpha_0 \in \mathbb{Z}[i]$, p be a prime number $(\alpha_0, p)_{\mathbb{N}} = 1$, $n \in \mathbb{N}$. Then we have

$$\tilde{K}(\alpha_0, \beta; p^n) = \begin{cases} 0 & \text{if } (\beta, p^n)_{\mathbb{N}} \equiv 0 \pmod{p}, \\ & n \geq 2; \\ -1 & \text{if } (\beta, p^n)_{\mathbb{N}} \equiv 0 \pmod{p}, \\ & n = 1. \end{cases}$$

The assertions of lemmas 1 and 2 are easily proved.

Lemma 3. Let $(\alpha, \beta, q)_{\mathbb{N}} = q_0$, $\alpha = \alpha_0 q_0$, $\beta = \beta_0 q_0$, $(\alpha_0, \beta_0, \frac{q}{q_0}) = 1$. Then

$$\tilde{K}(\alpha, \beta; q) = \sum_{d|q_0} d^2 I(d) \tilde{K}\left(\alpha_0, \frac{\beta_0 q_0^2}{d^2}, \frac{q}{d}\right),$$

where $I(d) = \#\{u \in \mathbb{Z}_d^*[i] \mid N(u) \equiv 1 \pmod{d}\}$.

Proof. By Lemma 1 we can consider only the case $q = p^n$, where p is a prime number. First, let $p \equiv 1 \pmod{2}$.

If $q_0 = 1$ the assertion of lemma is evident.

$$\begin{aligned} \tilde{K}(\alpha, \beta; p^n) &= \sum_{\substack{x, y \in \mathbb{Z}_{p^n}^*[i] \\ N(xy) \equiv 1 \pmod{p^n}}} 1 = \\ &= \tilde{\varphi}(p^n) \sum_{\substack{N(y) \equiv h \pmod{p^n} \\ (h, p) = 1}} 1 = \tilde{\varphi}(p^n) I(p^n) = \\ &= p^{3(n-1)}(p-1) \left(p - 1^{\frac{p-1}{2}}\right)^2. \end{aligned}$$

We take into account that

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(p^n) &= p^{2n-2}(p-1) \left(p - 1^{\frac{p-1}{2}}\right), \\ I(p^n) &= p^{n-1} \left(p - 1^{\frac{p-1}{2}}\right). \end{aligned}$$

On the other hand

$$\begin{aligned} \sum_{d|p^n} d^2 I(d) \tilde{K}\left(\alpha_0, \frac{\beta_0 q_0^2}{d^2}, \frac{q}{d}\right) &= \\ &= \sum_{\ell=0}^n p^{2\ell} I(p^\ell) \tilde{K}(\alpha_0, \beta_0 p^{2(n-\ell)}; p^{n-\ell}) = \\ &= p^{2(n-1)} I(p^{n-1}) \mu(p) + p^{2n} I(p^n) = \\ &= p^{3(n-1)}(p-1) \left(p - 1^{\frac{p-1}{2}}\right). \end{aligned}$$

Let $0 < k < n$. Then we have

$$\begin{aligned} \tilde{K}(\alpha, \beta; p^n) &= \sum_{\substack{u \in \mathbb{Z}_{p^n}^*[i] \\ N(u) \equiv 1 \pmod{p^n}}} K(\alpha, \beta u; p^n) = \\ &= \sum_{\substack{u \in \mathbb{Z}_{p^n}^*[i] \\ N(u) \equiv 1 \pmod{p^n}}} \sum_{\ell=0}^k N(p^\ell) K(\alpha_0, \beta_0 p^{2(k-\ell)}; p^{n-\ell}). \end{aligned}$$

Now Lemma 2 gives advance

$$\begin{aligned} \tilde{K}(\alpha, \beta; p^n) &= N(p^k) I(p^k) \tilde{K}(\alpha_0, \beta_0; p^{n-k}) = \\ &= \sum_{\ell=0}^k p^{2\ell} I(p^\ell) \tilde{K}(\alpha_0, \beta_0 p^{2(\ell-k)}; p^{n-k}). \end{aligned}$$

The case $p = 2$ can be consider similarly. $\square$

Corollary 1. Let $q = q_1 q_2$, $(q_1, q_2) = 1$, q_1 is a freesquare and q_2 is a squarefull number. Let $(\beta, q)_{\mathbb{N}} = d_1 d_2$, $d_1 | q_1$, $d_2 | q_2$. Then for $d_1 d_2 > 1$ and $(\alpha_0, q)_{\mathbb{N}} = 1$ we have

$$\tilde{K} = \begin{cases} \mu(q_1) \tilde{K}\left(\alpha_0, \beta d_1^2; \frac{q}{d_1}\right) & \text{if } q_2 = 1, \\ 0 & \text{if } q_2 > 1, \end{cases}$$

Let $d | q_1$. Then $(d, \frac{q}{d}) = 1$. Let $\bar{d}$ means the solution of the congruence $dx \equiv 1 \pmod{\frac{q}{d}}$.

Corollary 2. In notations of the Corollary 1 we have for $\Re s > 1$:

$$\begin{aligned} \sum_{0 \neq \omega \in \mathbb{Z}[i]} \frac{\tau(\omega) \tilde{K}(\alpha_0, \omega q; \omega)}{N(\omega)^s} &= \\ &= \sum_{d|q_1} \mu(d) \sum_{\omega(\omega, q)_{\mathbb{N}} = d} \frac{\tau(\omega)}{N(\omega)^s} \tilde{K}\left(\alpha_0, \omega \bar{d}^2; \frac{q}{d}\right). \end{aligned}$$

Lemma 4. Let p be a prime number, $p \in \mathbb{N}$, $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}[i]$, $(\alpha, \beta, p)_{\mathbb{N}} = 1$. Then $\tilde{K}(\alpha, \beta; p^n) \ll p^{\frac{3}{2}n}$ with an absolute constant in symbol " $\ll$ ".

3 Main result

Let $q = q_1 q_2$, $q_1, q_2 \in \mathbb{N}$, $(q_1, q_2) = 1$, q_1 is a freesquare part of q , and q_2 is a squarefull part of q . For $d | q_1$, we have $(d, \frac{q}{d}) = 1$, and thus for $\Re s > 1$:

$$\begin{aligned} F(s; d, q) &= \sum_{\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{Z}^*\left[\frac{q}{d}; i\right]} \sum_{d_1 d_2 = d} (d_1 d_2)^{-s} \times \\ &\times \sum_{\substack{\omega_j \in \mathbb{Z}[i] \\ (\omega_j, \frac{q}{d})_{\mathbb{N}} = 1 \\ j=1,2}} \frac{e(\Re(\mathfrak{U}))}{N(\omega_1 \omega_2)^s} = \\ &= \sum_{(\omega, q)_{\mathbb{N}} = d} N(\omega)^{-s} \sum_{d_1 d_2 = d} \sum_{\substack{\omega_1, \omega_2 \in \mathbb{Z}\left[\frac{q}{d}; i\right] \\ d_1 \omega_1, d_2 \omega_2 = \omega}} \times \\ &\times \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{Z}^*\left[\frac{q}{d}; i\right] \\ N(\alpha_1 \alpha_2) \equiv 1 \pmod{\frac{q}{d}}}} e(\Re(\mathfrak{U})) = \\ &= \sum_{(\omega, q)_{\mathbb{N}} = d} \frac{\tau(\omega) \tilde{K}(\alpha_0, \omega \bar{d}; \frac{q}{d})}{N(\omega)^s}, \end{aligned} \quad (1)$$

where $\mathfrak{U} := \frac{\alpha_0 \alpha_1 d_1 \omega_1 \bar{d} + \alpha_2 d_2 \omega_2 \bar{d}}{\frac{q}{d}}$.

And also

$$\begin{aligned} F(s; d, q) &= \sum_{b_1, b_2 \in \frac{q}{d}} \frac{\mu(b_1) \mu(b_2)}{(b_1 b_2)^{2s}} \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{Z}^*\left[\frac{q}{d}; i\right] \\ N(\alpha_1 \alpha_2) \equiv 1 \pmod{\frac{q}{d}}}} \times \\ &\times \sum_{d_1 d_2 = d} \left(Z\left(s; 0, \Re\left(\frac{\alpha_0 \alpha_1 b_1 d_1 \bar{d}}{\frac{q}{d}}\right)\right) \times \right. \\ &\times \left. Z\left(s; 0, \Re\left(\frac{\alpha_2 d_2 b_2 \bar{d}}{\frac{q}{d}}\right)\right) \right), \end{aligned} \quad (2)$$

where $Z(s; \delta_0, \delta) = \sum_{\omega} \frac{\varepsilon(\Re(\omega\delta))}{N(\omega+\delta_0)^s}$ is the Hecke zeta-function.

We define the following function for $(\alpha_0, q)_{\mathbb{N}} = 1$:

$$F(s) = \sum_{0 \neq \omega \in \mathbb{Z}[i]} \frac{\tau(\omega) \tilde{K}(\alpha_0, \omega; q)}{N(\omega)^s}, \quad \Re s > 1.$$

By (1)-(2) we get $F(s) = \sum_{d|q} \frac{\mu(d) F(s; d)}{d^{2s}} =$

$$= \sum_{d|q} \frac{\mu(d)}{d^{2s}} \sum_{b_1, b_2 | \frac{q}{d}} \frac{\mu(b_1) \mu(b_2)}{(b_1 b_2)^{2s}} \sum_{d_1 d_2 = d} \times \\ \times \sum_{N(d_1 d_2) \equiv 1 \pmod{\frac{q}{d}}} \left(Z\left(s; 0, \Re\left(\frac{\alpha_0 \alpha_1 b_1 d_1 \bar{d}}{\frac{q}{d}}\right)\right) \times \right. \\ \left. \times Z\left(s; 0, \Re\left(\frac{\alpha_2 b_2 d_2 \bar{d}}{\frac{q}{d}}\right)\right) \right).$$

Applying Perron's formula and moving the contour of integration on the line $\Re s = -\varepsilon$, we obtain for $c = 1 + \varepsilon$

$$\sum_{\substack{\omega \\ N(\omega) \leq x}} \tau(\omega) \tilde{K}(\alpha_0, \omega; q) = \\ = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-iT}^{c+iT} F(s) \frac{x^s}{s} ds + O\left(\frac{q^{\frac{3}{2}} x^{1+\varepsilon}}{T}\right) = \\ = \sum_{s=0,1} \operatorname{res} \left(F(s) \frac{x^s}{s} \right) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\varepsilon-iT}^{-\varepsilon+iT} F(s) \frac{x^s}{s} ds + \\ + O(q^{2+\varepsilon} T^{1+\varepsilon}) + O\left(\frac{q^{\frac{3}{2}} x^{1+\varepsilon}}{T}\right).$$

Here we take into account the estimate from Lemma 4 $\tilde{K}(\alpha, \beta; q) \ll q^{\frac{3}{2}} ((\alpha, \beta, q)_{\mathbb{N}})^{\frac{1}{2}}$ and the estimate for $F(s)$ in stripe $-\varepsilon \leq \Re s \leq 1 + \varepsilon$:

$$F(\sigma + it) \ll q^{2+\frac{1}{2}\sigma+4\varepsilon} |t|^{(2+4\varepsilon)(1-\sigma)} \tau^2(q), \quad (|t| > 1),$$

which can be obtain from the estimates of $F(s)$ for $\Re s = 1 + \varepsilon$ and $\Re s = -\varepsilon$ by the Frigmen-Lindelöff principle.

To evaluate the integral $\int_{-\varepsilon-iT}^{-\varepsilon+iT} F(s) \frac{x^s}{s} ds$ we apply the functional equation for $Z(s; \delta_0, \delta)$ and use the representation of $Z(s; \delta_0, \delta)$ by an uniformly convergent series.

Hence, we obtain the estimate (putting $T = x^{\frac{1}{2}} q^{-\frac{1}{4}}$): $\sum_{\omega N(\omega) \leq x} \tau \omega \tilde{K}(\alpha_0, \omega; q) = \sum_{s=0,1} \operatorname{res} \left(F(s) \frac{x^s}{s} \right) + O\left(x^{\frac{1}{2}+\varepsilon} q^{\frac{7}{4}}\right)$ (for details, see [2]).

Moreover, by the simple calculations we infer

$$\operatorname{res}_{s=0} \left(F(s) \frac{x^s}{s} \right) = F(0) = \begin{cases} 0 & \text{if } q_2 > 1 \\ \tau(q) & \text{if } q_2 = 1. \end{cases}$$

Further, from the relation for $F(s)$ we note that the double pole is generated by the only such summands defined $F(s)$, for which

$$\begin{aligned} &\text{or } \{\alpha_1 = \pm i, \alpha_2 = \mp i\} \\ &\text{or } \{\alpha_1 = \pm i, \alpha_2 \neq \pm i, \beta_2 = \frac{q}{d}\}, \\ &\text{or } \{\alpha_2 = \pm i, \alpha_1 \neq \pm i, \beta_1 = \frac{q}{d}\}, \\ &\text{or } \{\alpha_1 \neq \pm i, \alpha_2 \neq \pm i, \beta_1 = \beta_2 = \frac{q}{d}\}. \end{aligned}$$

The rest summands can give only the simple pole in $s = 1$.

Hence, after simple calculation we find

$$\operatorname{res}_{s=1} \left(F(s) \frac{x^s}{s} \right) = A(q) \log x + B(q)x,$$

where

$$A(q) = \pi^2 \left(2 + \sum_{\substack{d|q \\ d>1}} \frac{\mu(d)}{d^2} \sum_{b_1, b_2 | \frac{q}{d}} \frac{\mu(b_1) \mu(b_2)}{b_1^2 b_2^2} + O\left(\frac{1}{q}\right) \right).$$

The coefficient $B(q)$ has similar form. The proof of theorem completed. Note that the asymptotic formula in the Theorem is non-trivial if $q \ll x^{\frac{2}{7}-\varepsilon}$.

References

1. R.W.Bruggeman, Y.Motohashi, Sum formula for Kloosterman sums and fourth moment of the Dedekind zeta-function over the Gaussian number field *Functiones et Approximatio*, XXXI (2003), pp. 23-92.
2. O. Sinyavski, Sum of divisor in the ring of Gaussian integer numbers, *Liet. matem. rink*, 41(2)(2001), pp. 240-251. (in Russian)
3. S. Varbanets, General Kloosterman sums over ring of Gaussian integers, *Ukr. Math. Journ*, Kyiv, 59(2007), pp.1179-1200.
4. P. Varbanets, S. Varbanets, On divisor function over $\mathbb{Z}[i]$, *Annales Univ. Sci. Budapest, Sect. Comp.*, 27(2007), pp.75-90.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 511.7

Н.М. Василенко

Про фрактальні властивості деяких множин канторівського типу, породжених $\widehat{\varphi}$ -зображенням дійсних чисел

У даній роботі розглядається $\widehat{\varphi}$ -зображення дійсних чисел, вивчаються властивості циліндричних множин, породжених даним зображенням та досліджуються властивості множин чисел з обмеженнями на вживання цифр в їх зображенні.

Ключові слова: $\widehat{\varphi}$ -зображення, циліндрична множина, розмірність Хаусдорфа-Безиковича.

E-mail: samkina_nata@mail.ru

Статтю представив д.ф.-м.н., професор Кириченко В.В.

1 Introduction

Definition 1.1. A sequence of real numbers (a_n) with

$$a_n = a_{n-1} + a_{n-2}, \quad n \geq 3, \quad (1)$$

is called the *Fibonacci sequence*.

Zero sequence $(0, 0, 0, \dots)$, classical Fibonacci sequence $(1, 1, 2, 3, 5, 8, \dots)$ and Lucas sequence $(1, 3, 4, 7, 11, 18, \dots)$ are examples of such sequences.

We can naturally introduce linear operations on the set of such sequences and obtain a two-dimensional linear space $\mathcal{F}$. There are many possibilities to introduce dot product, norm, distance, Lebesgue measure, Hausdorff measure, and fractal dimension (in particular, Hausdorff-Besicovitch dimension) on $\mathcal{F}$.

It is possible to use the elements of space $\mathcal{F}$ as determining sequences for representation systems of real numbers. The infinitesimal sequence $(1, \widehat{\varphi}, \widehat{\varphi}^2, \dots)$, where $\widehat{\varphi} = \frac{1-\sqrt{5}}{2}$ is a root of the equation $x^2 - x - 1 = 0$, i.e.,

$$\widehat{\varphi} = \widehat{\varphi}^2 - 1 < 0, \quad \frac{1}{\widehat{\varphi}} = \widehat{\varphi} - 1, \quad \widehat{\varphi}^n = \widehat{\varphi}^{n-2} + \widehat{\varphi}^{n-1},$$

for any $n \in N$, is the most attractive choice in this regard.

N.M. Vasylenko

On fractal properties of some Cantor-like sets generated by $\widehat{\varphi}$ -representation of real numbers

In the paper, we discuss the $\widehat{\varphi}$ -representation of real numbers; study properties of cylindrical sets generated by this representation and properties of the sets of numbers with conditions on use of digits in their representation.

Key Words: $\widehat{\varphi}$ -representation, cylindrical set, Hausdorff-Besicovitch dimension.

2 $\widehat{\varphi}$ -representation

Let $A = \{0, 1\}$ and $L = A \times A \times \dots \times A \times \dots$. Consider the functional correspondence f between the set L and $\mathbb{R}^1$:

$$L \ni (\alpha_n) \xrightarrow{f} x \in \mathbb{R}^1$$

given by the equality

$$x = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \widehat{\varphi}^{n-1}.$$

Theorem 2.1. The range of function f is the closed interval $[-1, \varphi]$ where $\varphi = -\widehat{\varphi}^{-1}$.

Proof. If $M \in 2^N$, i.e., $M \subseteq N$, then number

$$x = x(M) = \sum_{n \in M} \widehat{\varphi}^{n-1} \quad (2)$$

is called the *incomplete sum* of the series

$$\sum_{n=1}^{\infty} \widehat{\varphi}^{n-1}. \quad (3)$$

Since equation (2) can be rewritten in the form

$$x(M) = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n \widehat{\varphi}^{n-1},$$

where

$$\varepsilon_n = \begin{cases} 1, & \text{при } n \in M, \\ 0, & \text{при } n \notin M, \end{cases}$$

the set E of all incomplete sums of the series (3) coincides with the range of function f .

It is easy to prove that the set of all incomplete sums of any convergent series is closed. To prove Theorem 2.1, it is enough to show that the set E is everywhere dense in $[-1, \varphi]$. The proof is by reductio ad absurdum.

Assume the converse, i.e., assume that interval $(\alpha, \beta) \subset [-1, \varphi]$ does not contain points from the set E . Let $(c_1 \dots c_{2n-1})$ be any ordered sequence consisting of zeroes and ones. By $\Delta_{c_1 c_2 \dots c_{2n-1}}$ denote the closed interval with endpoints

$$\begin{aligned} a_{c_1 \dots c_{2n-1}} &= \sum_{i=1}^{2n-1} c_i \varphi^{i-1} + \sum_{j=n}^{\infty} \varphi^{2j-1} = \\ &= \sum_{i=1}^{2n-1} c_i \varphi^{i-1} - \varphi^{2n-2} \end{aligned} \quad (4)$$

and

$$\begin{aligned} b_{c_1 \dots c_{2n-1}} &= \sum_{i=1}^{2n-1} c_i \varphi^{i-1} + \sum_{j=n}^{\infty} \varphi^{2j} = \\ &= \sum_{i=1}^{2n-1} c_i \varphi^{i-1} - \varphi^{2n-1}. \end{aligned} \quad (5)$$

It is evident that

$$\min \Delta_{c_1 c_2 \dots c_{2n-1}} = a_{c_1 \dots c_{2n-1}} \in E,$$

$$\max \Delta_{c_1 c_2 \dots c_{2n-1}} = b_{c_1 \dots c_{2n-1}} \in E.$$

Similarly, by $\Delta_{c_1 c_2 \dots c_{2n}}$, where $c_i \in \{0, 1\}$, denote the closed interval with endpoints

$$\begin{aligned} a_{c_1 \dots c_{2n}} &= \sum_{i=1}^{2n} c_i \varphi^{i-1} + \sum_{j=n}^{\infty} \varphi^{2j+1} = \\ &= \sum_{i=1}^{2n} c_i \varphi^{i-1} - \varphi^{2n} \end{aligned} \quad (6)$$

and

$$\begin{aligned} b_{c_1 \dots c_{2n}} &= \sum_{i=1}^{2n} c_i \varphi^{i-1} + \sum_{j=n}^{\infty} \varphi^{2j} = \\ &= \sum_{i=1}^{2n} c_i \varphi^{i-1} - \varphi^{2n-1} \end{aligned} \quad (7)$$

where $\min \Delta_{c_1 c_2 \dots c_{2n}}, \max \Delta_{c_1 c_2 \dots c_{2n}} \in E$.

The set $\Delta_{c_1 c_2 \dots c_k}$ is called the *cylindrical closed interval of rank k with base $c_1 \dots c_k$* . The cylindrical closed intervals have the following properties.

P. 2.1. $\Delta_{c_1 \dots c_k} = \bigcup_{i_{k+1}=0}^1 \dots \bigcup_{i_{k+m}=0}^1 \Delta_{c_1 \dots c_k i_{k+1} \dots i_{k+m}}$ for any $m \in N$.

P. 2.2. $\Delta_{c_1 \dots c_k 0} \cap \Delta_{c_1 \dots c_k 1} \neq \emptyset$.

P. 2.3. $\bigcup_{i_1=0}^1 \dots \bigcup_{i_k=0}^1 \Delta_{i_1 \dots i_k} = [-1, \varphi], k \in N$.

P. 2.4. $|\Delta_{c_1 \dots c_k}| = (-1)^k \varphi^{k-2} \rightarrow 0 (k \rightarrow \infty)$.

Remark. All cylindrical sets of the same rank have the same lengths.

It follows from properties 2.3 and 2.4 that there exists cylindrical closed interval belonging to (α, β) , but its endpoints belong to E . This contradiction proves the theorem. $\square$

Definition 2.1. Representation of the number x from $[-1, \varphi]$ in the form

$$x = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n \varphi^{n-1} = \varepsilon_1 \varphi^0 + \varepsilon_2 \varphi^1 + \dots + \varepsilon_n \varphi^{n-1} + \dots, \quad (8)$$

where $\varepsilon_n \in \{0, 1\}$, is called the φ -representation (φ -expansion) of this number. We denote symbolically this expression by

$$x = \Delta_{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_n \dots} \quad (9)$$

and call it by φ -representation of this number.

By the previous theorem, it follows that φ -representation (φ -expansion) is well defined.

Definition 2.2. The *cylinder of rank k with base $c_1 \dots c_k$* , where $c_i \in \{0, 1\}$, is the set of all points $x \in [-1, \varphi]$ represented in the form

$$x = \sum_{i=1}^k c_i \varphi^{i-1} + \sum_{n=k+1}^{\infty} \varepsilon_n \varphi^{n-1}, \quad \varepsilon_n \in \{0, 1\}. \quad (10)$$

Definition 2.1 and Theorem 2.1 imply the following proposition.

Corollary 2.1. *Cylinder with base $c_1 \dots c_k$ coincides with cylindrical closed interval with the same base.*

Remark 2.1. The set

$$\nabla_{c_1 \dots c_k} = (\min \Delta_{c_1 \dots c_k}; \max \Delta_{c_1 \dots c_k})$$

is said to be the *cylindrical interval of rank k with base $c_1 \dots c_k$* .

Besides the above properties, cylinders have the following important properties.

P. 2.5. $\Delta_{c_1 \dots c_k} \equiv \bigcap_{k=1}^{\infty} \Delta_{c_1 \dots c_k} = x \in [-1, \varphi]$.

P. 2.6. The following equality holds:

$$\frac{|\Delta_{c_1 \dots c_k c}|}{|\Delta_{c_1 \dots c_k}|} = -\varphi, \quad \forall k \in N.$$

P. 2.7. For cylinders of rank $2n$

$$1) \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 1} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 0} = \left[\sum_{i=1}^{2n-1} c_i \widehat{\varphi}^{i-1} - \widehat{\varphi}^{2n}; \sum_{i=1}^{2n-1} c_i \widehat{\varphi}^{i-1} \right];$$

$$2) \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 01} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 11} = \max \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 01} = \min \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 11} = \sum_{i=1}^{2n-2} c_i \widehat{\varphi}^{i-1};$$

$$3) \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 00} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 10} = \max \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 00} = \min \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 10} = \sum_{i=1}^{2n-2} c_i \widehat{\varphi}^{i-1} - \widehat{\varphi}^{2n-1}.$$

P. 2.8. For cylinders of rank $2n + 1$

$$1) \Delta_{c_1 \dots c_{2n} 0} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n} 1} = \left[\sum_{i=1}^{2n} c_i \widehat{\varphi}^{i-1}; \sum_{i=1}^{2n} c_i \widehat{\varphi}^{i-1} - \widehat{\varphi}^{2n+1} \right];$$

$$2) \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 10} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 00} = \max \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 10} = \min \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 00} = \sum_{i=1}^{2n-1} c_i \widehat{\varphi}^{i-1} - \widehat{\varphi}^{2n};$$

$$3) \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 11} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 01} = \max \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 11} = \min \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 01} = \sum_{i=1}^{2n-1} c_i \widehat{\varphi}^{i-1}.$$

P. 2.9. For any $n \in N_0$

$$\Delta_{c_1 \dots c_n 110} \equiv \Delta_{c_1 \dots c_n 001}.$$

P. 2.10. For any $n \in N$

$$\frac{|\Delta_{c_1 \dots c_n 0} \cap \Delta_{c_1 \dots c_n 1}|}{|\Delta_{c_1 \dots c_n}|} = -\widehat{\varphi}^3.$$

P. 2.11. For any $n \in N$

$$\begin{aligned} & \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 0} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 1} = \\ & = \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 00} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 11} = \\ & = \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 001} = \Delta_{c_1 \dots c_{2n-2} 110}, \\ & \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 1} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 0} = \\ & = \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 11} \cap \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 00} = \\ & = \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 110} = \Delta_{c_1 \dots c_{2n-1} 001}. \end{aligned}$$

3 Cantor-like sets

Let $V_n = \begin{cases} \{0, 1\} & \text{if } n = 2k - 1, \\ 1 & \text{if } n = 2k. \end{cases}$ By $C[\widehat{\varphi}, V_n]$

denote the set of all numbers from $[-1, \varphi]$ such that the n -th symbol of their $\widehat{\varphi}$ -representation take values from the set V_n . We study topological, metric and fractal properties of this set.

Theorem 3.1. $C[\widehat{\varphi}, V_n] = C$ is a nowhere dense set of zero Lebesgue measure, and the Hausdorff-Besicovitch dimension of C is equal to $\log_{\varphi^2} 2$ where $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$.

Proof. It is evident that

$$C = [\Delta_{01} \cap C] \cup [\Delta_{11} \cap C] = C_1 \cup C_2.$$

Suppose the set C_1 is similar to the set C with ratio k . It is clear that

$$k = \frac{d(C_1)}{d(C)}.$$

Calculate $d(C)$. From

$$C = \bigcup_{c_1 \in V_1} \dots \bigcup_{c_{2n-1} \in V_{2n-1}} \Delta_{c_1 1 c_3 1 \dots 1 c_{2n-1} 1}$$

and equalities

$$\max \Delta_{c_1 1 \dots 1 c_{2n-3} 101} = \min \Delta_{c_1 1 \dots 1 c_{2n-3} 111}, \quad (11)$$

$$\Delta_{c_1 1 \dots 1 c_{2n-3} 10111} \cap \Delta_{c_1 1 \dots 1 c_{2n-3} 11101} = \emptyset, \quad (12)$$

it follows that

$$\begin{aligned} d(C) &= \varphi + 1 - (\max \Delta_{10} - \max \Delta_{11}) - \\ & - (\min \Delta_{1101} - \max \Delta_{0111}) - \\ & - 2(\min \Delta_{c_1 11101} - \max \Delta_{c_1 10111}) - \\ & - 2^2(\min \Delta_{c_1 1 c_3 11101} - \max \Delta_{c_1 1 c_3 10111}) - \\ & - \dots - \\ & - 2^{n-1}(\min \Delta_{c_1 1 \dots 1 c_{2n-3} 11101} - \\ & - \max \Delta_{c_1 1 \dots 1 c_{2n-3} 10111}) - \dots = \\ & = \varphi + 1 - (\varphi - 1) - (-\widehat{\varphi}^3) - 2(-\widehat{\varphi}^5) - \\ & - 2^2(-\widehat{\varphi}^7) - \dots - 2^{n-1}(-\widehat{\varphi}^{2n+1}) - \dots = \\ & = 2 + \frac{\widehat{\varphi}^3}{1-2\widehat{\varphi}^2} = 1. \end{aligned}$$

Calculate $d(C_1)$. From

$$C_1 = \bigcup_{c_3 \in V_3} \dots \bigcup_{c_{2n-1} \in V_{2n-1}} \Delta_{01 c_3 1 \dots 1 c_{2n-1} 1}$$

and equalities (11), (12) it follows that

$$\begin{aligned} d(C_1) &= 1 - (\max \Delta_{0110} - \max \Delta_{0111}) - \\ &\quad - (\min \Delta_{011101} - \max \Delta_{010111}) - \\ &\quad - 2(\min \Delta_{01c_311101} - \max \Delta_{01c_310111}) - \\ &\quad - 2^2(\min \Delta_{01c_31c_311101} - \\ &\quad - \max \Delta_{01c_31c_310111}) - \\ &\quad - \dots - \\ &\quad - 2^{n-2}(\min \Delta_{01c_31\dots1c_{2n-3}11101} - \\ &\quad - \max \Delta_{01c_31\dots1c_{2n-3}10111}) - \dots = \\ &= 1 - (-\varphi^3) - (-\varphi^5) - 2(-\varphi^7) - \\ &\quad - 2^2(-\varphi^9) - \dots - 2^{n-2}(-\varphi^{2n+1}) - \dots \\ &= 1 + \varphi^3 + \frac{\varphi^5}{1-2\varphi^2} = \varphi^2 = \varphi^{-2}. \end{aligned}$$

Then $k = \frac{d(C_1)}{d(C)} = \varphi^{-2}$.

It is easy to check that the set C_2 is similar to the set C with the same ratio k .

Thus $C = C_1 \cup C_2$, $C_i \stackrel{k}{\sim} C$, $i \in \{1, 2\}$ and $\lambda(C_1 \cap C_2) = 0$, i.e., C is a self-similar set by definition [9, p. 24]. Then its self-similar dimension α is a root of the equation

$$2k^\alpha = 1.$$

Hence $\alpha = \log_k 2^{-1} = \log_{\varphi^{-2}} 2^{-1} = \log_{\varphi^2} 2$.

By property 2.7,

$$\begin{aligned} \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}101} \cap \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}111} &= \\ &= \max \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}101} = \\ &= \min \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}111} = \\ &= [\min \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}101}; \max \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}111}]. \end{aligned}$$

Then $C[\varphi, V_n]$ is a nowhere dense set. It follows from the fact: for any $m \geq 2$, there exist a union of cylinders with subinterval not belonging to this set. Namely,

$$\begin{aligned} \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}101} \cup \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}111} \supset \\ \supset (\max \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}10111}; \min \Delta_{c_11c_3\dots c_{2m-3}11101}) \notin \\ \notin C[\varphi, V_n]. \quad \square \end{aligned}$$

Corollary 3.1. *If*

$$V_m = \begin{cases} \{0, 1\}, & \text{if } m = 2k - 1, \\ 0, & \text{if } m = 2k, \end{cases}$$

then $C[\varphi, V_m]$ is a nowhere dense set of zero Lebesgue measure, and the Hausdorff-Besicovitch dimension of this set is equal to $\log_{\varphi^2} 2$ where $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$.

Corollary 3.1 follows from the symmetry of cylinders $\Delta_{c_1\dots c_n 0}$ and $\Delta_{c_1\dots c_n 1}$ about the centre of $\Delta_{c_1\dots c_n}$ and property 2.7.

References

1. Ambrož P., Frougny C., Masáková Z., Pelantová E. Arithmetics on number systems with irrational bases // Bull. Belg. Math. Soc. — 10. — 2003. — P. 641–659.
2. Bergman G. A number system with an irrational base // Mathematics Magazine. — 31, no. 2. — 1957. — P. 98–110.
3. Erdős P. On a family of symmetric Bernoulli convolutions // Amer. J. Math. — 1939. — 4. — P. 974–976.
4. Gilbert W. J., Green R. J. Negative based number systems // Mathematics Magazine. — 52, no. 4. — 1979. — P. 240–244.
5. Ribenboim P. My numbers, my friends: popular lectures on number theory. — New York: Springer-Verlag, 2000. — 384 p.
6. Vasylenko N. M. Fibonacci representations of real numbers // Trans. Drahomanov National Pedagogical Univ. Ser. 1, Phys. Math. — Kyiv: Drahomanov National Pedagogical Univ., 2005. — 6. — P. 261–271.
7. Vasylenko N. M. Some metric relations generated by Φ -representation of real numbers // Trans. Drahomanov National Pedagogical Univ. Ser. 1, Phys. Math. — Kyiv: Drahomanov National Pedagogical Univ., 2006. — 7. — P. 190–203.
8. Vasylenko N. M., Pratsiovytyi M. V. Mathematical structures in the space of Fibonacci sequences // Trans. Drahomanov National Pedagogical Univ. Ser. 1, Phys. Math. — Kyiv: Drahomanov National Pedagogical Univ., 2008. — 9. — 22 p.
9. Pratsiovytyi M. V. Fractal approach to investigations of singular probability distributions. — Kyiv: Drahomanov National Pedagogical Univ., 1998. — 296 p.

Надійшла до редколегії 30.04.2010

УДК 532.5

Еліна М. Безим'яна, пошукувач
Олександр А. Гуржій, к.ф.-м.н.

Хаотична адвекція розчинів електро-осмотичними течіями в мікроканалах

Розглядаються двовимірні процеси перемішування розчинів електро-осмотичними течіями в каналі з прямокутним поперечним перетином. Гідродинамічна задача зводиться до розв'язку бігармонійного рівняння, що описує течію в'язкої нестисливої рідини. Показано, що течія, сформована періодичним рухом сегментів границь, приводить до істотної інтенсифікації процесів перемішування.

Ключові слова: електро-осмотична течія, наближення Стокса, хаотична адвекція.

E-mail: a.gourjii@gmail.com

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н. професор Мелешко В.В.

Останнім часом перед дослідниками постало багато проблем, які вже сьогодні вимагають свого практичного вирішення. Найбільш показовою в цьому аспекті є задача про перемішування розчинів електролітів електро-осмотичними течіями в мікроканалах при створенні хімічних мікропроцесорів [1]. Розробка технології перемішування в мікроканалах з характерним поперечним розміром порядку 200 - 500 мкм є складною науковою і інженерною проблемою.

Одне з вирішень цієї проблеми пов'язано з формуванням поперечної течії в мікроканалах за рахунок зовнішнього електричного поля [2]. При цьому в прилеглому до електродів шарі (Дебаєвській шар), виникає наведене внутрішнє електричне поле, направлене по дотичній до границі. Воно приводить до утворення об'ємної сили, яка зміщує прилеглий до електродів шар (рис.1,а).

Аналіз масштабів показує, що товщина Дебаєвського шару набагато менше характерного розміру порожнини і рідина знаходиться під дією дотичної швидкості, прикладеної до границь. Застосовуючи аналогію між електро-осмотичними течіями і нестисливими течіями в гідродинаміці [2], дану задачу можна звести до двовимірної задачі про течію в'язкої нестисливої рідини в наближенні Стокса усередині

Elina M. Bezymyana, researcher
Alexandre A. Gourjii, Cand. Sci. (Phys.-Math.)

Chaotic advection of electro-osmotic solutions by flows in microchannels

The two-dimensional mixing processes of solutions by the electro-osmotic flows in a channel with the rectangular cross section are considered. The hydrodynamic problem is reduced to the solution of a biharmonic equation describing flow of viscid incompressible fluid. It is shown that the flow formed by periodic motion of boundary segments results in substantial intensification of mixing processes.

Key Words: electro-osmotic flow, Stokes approximation, chaotic advection.

прямокутної порожнини з рухомими границями (рис.1,б).

Розглянемо двовірну періодичну течію в'язкої нестисливої рідини в прямокутній порожнині з розмірами $2a \times 2b$ (рис.1,б). Хай протягом першого напівперіоду ($NT < t < NT+T/2$, де N - номер періоду) нижня границя рухається з постійною швидкістю U_1 , а верхня - з постійною швидкістю $U_2 = \alpha U_1$. Потім протягом другого напівперіоду ($NT+T/2 < t < (N+1)T$) верхня границя переміщується з швидкістю $-U_1$, а нижня зміщується з постійною швидкістю $U_2 = \alpha U_1$. Зважаючи на малі розміри порожнини і швидкості руху границь (0.1 - 0.5 мм/с), дана задача може бути розв'язана в наближенні Стокса ($Re \ll 1$). Для визначення розподілу поля швидкості необхідно розв'язати бігармонічне рівняння щодо функції тока

$$\frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \Psi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \Psi}{\partial y^4} = 0 \quad (1)$$

с граничними умовами

$$\begin{aligned} \Psi(\pm a, y) = 0, \quad \Psi(x, \pm b) = 0, \\ \left. \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|_{x=\pm a} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right|_{y=\pm b} = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

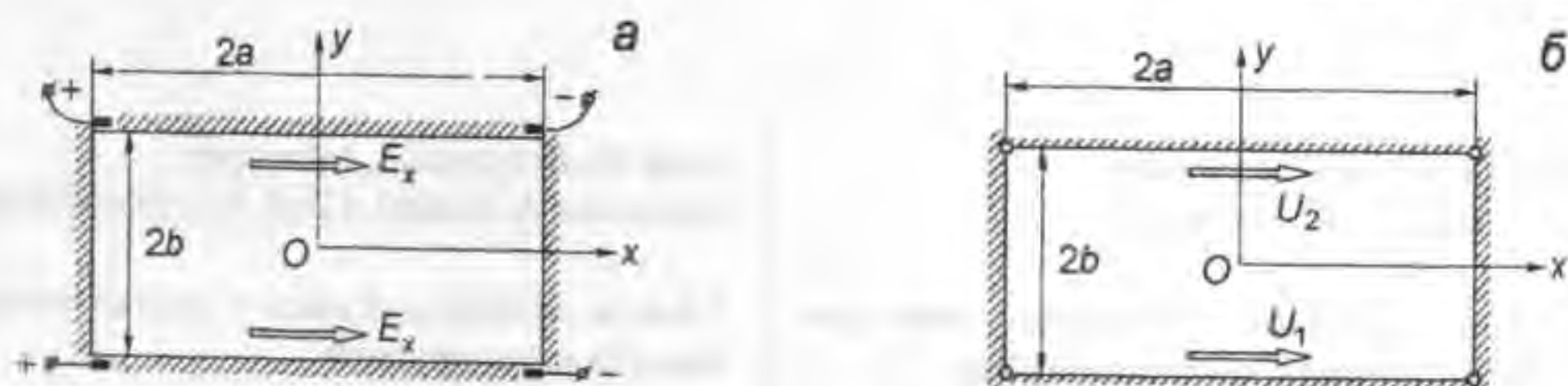


Рис.1. Аналогія між електро-осмотичною течією (а) в поперечному перетині мікроканала і течією в'язкої нестисливої рідини (б) усередині прямокутної порожнини

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|_{x=\pm a} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right|_{y=-b} = U_1, \quad \left. \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right|_{y=b} = U_2.$$

Розв'язок поставленої задачі можна представити у вигляді суперпозиції двох задач з симетричним і несиметричним розподілом функцій току по осі ординат. Аналітичні вирази задачі (1,2), розв'язаної методом поліпшеної редукції, представлено в роботі [3].

Використовуючи зв'язок між функцією току і розподілом поля швидкості

$$U(x, y) = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad V(x, y) = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (3)$$

знаходимо вирази для компонент поля швидкості, які використовуються надалі при проведенні обчислень.

Умова рівності швидкості нескінченно малої неінертної рідкої частинки і швидкості зовнішньої течії приводить до рівняння адвекції [4], яке є системою звичайних диференціальних рівнянь

$$\frac{dx}{dt} = U(x, y), \quad \frac{dy}{dt} = V(x, y) \quad (4)$$

з початковими умовами: $x(0) = x_0$, $y(0) = y_0$.

Надалі задачу зручно аналізувати в безрозмірному вигляді. Пронормуємо всі геометричні розміри на напіввисоту b порожнини, а час віднесемо до періоду T . В цьому випадку швидкості будуть віднесені до величини b/T . Дана течія характеризується безрозмірним параметром

$$D = \frac{U_1 T}{2b}. \quad (5)$$

Розглянемо особливості процесу адвекції рідини в порожнині при $a = 1.0$, $\alpha = 0.5$. На рис.3 показаний перетин Пуанкаре, виконаний для маркерів, при різних значеннях параметра течії. При $D = 0.5$ (рис.2,а) перетин Пуанкаре має регулярну структуру тільки в лівій частині порожнини. Біля рухомих границь і в правій частині порожнини перетин Пуанкаре є

хаотичним. Перетин має дві періодичні еліптичні точки ($E_1^{(1)}$ і $E_2^{(1)}$) першого порядку.

При збільшенні швидкості руху границь (рис.2,б при $D = 10.0$) область хаотичного руху окремих рідких частинок займає практично весь перетин порожнини. При цьому з'являються дві пари еліптичних періодичних точок ($E_1^{(1)}, E_3^{(2)}$ і $E_4^{(1)}, E_2^{(2)}$) другого порядку, які розташовані в кутках порожнини. При подальшому збільшенні параметра D в перетині Пуанкаре з'являються періодичні еліптичні і гіперболічні точки високих порядків.

Для визначення координат періодичних точок течії використовувалася методика [5], в якій було показано, що періодичні точки течії (порядку N) з осьовою симетрією в моменти часу $t_A = T/4$ і $t_N = (2N+1)T/4$ повинні знаходитися на осі симетрії. Положення періодичних точок порядку N обчислюються після інтегрування рівнянь руху (4) і визначення координат рідких частинок в моменти $t_N = nT$, $n = 1, \dots, N$.

Положення y^* рідкої частинки на осі симетрії у момент часу t_A (рис.3) часто вважають параметром періодичної траєкторії і використовують при аналізі динаміки зміни кількості періодичних точок і їх типу.

Біфуркаційну діаграму періодичних точок першого порядку показано на рис.4. Видно, що при малих D в течії є дві еліптичні і одна гіперболічна періодичні точки. При $D \approx 10.75$ відбувається перша біфуркація, в результаті якої з'являються гіперболічна і еліптична періодичні точки при $y^* \rightarrow -1$. При $D \approx 16.6$ в течії відбувається послідовність біфуркацій з утворенням декількох пар періодичних точок різного типу. Течія рідини в порожнині істотно ускладнюється.

Причину існування різних режимів адвекції рідини в даній течії можна пояснити на рис.5,а, де показано процес адвекції виділеної рідини (квадрат $ABCD$), що охоплює періодичну еліптичну точку $(-0.09, 0.66)$ при $D = 10.0$. На

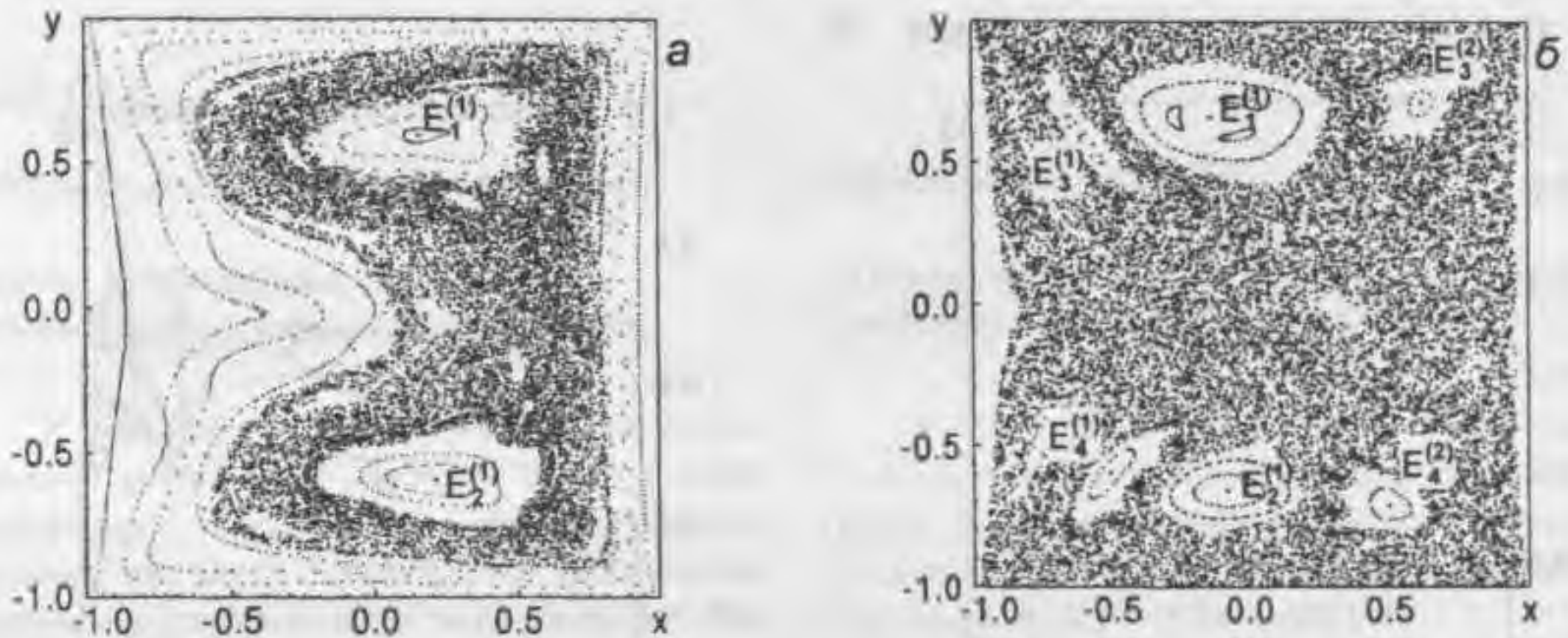


Рис.2. Перетин Пуанкаре при різних значеннях швидкості руху границь: а) $D = 5.0$, б) $D \approx 10.0$

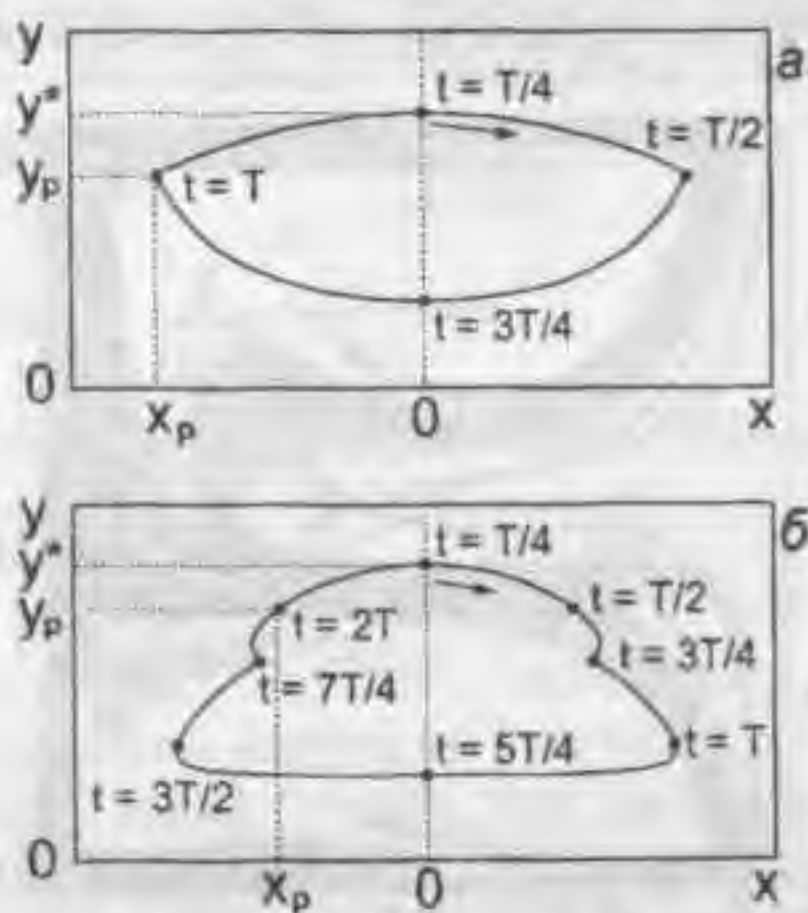


Рис.3. Визначення положення періодичних точок першого (а) і другого (б) порядків

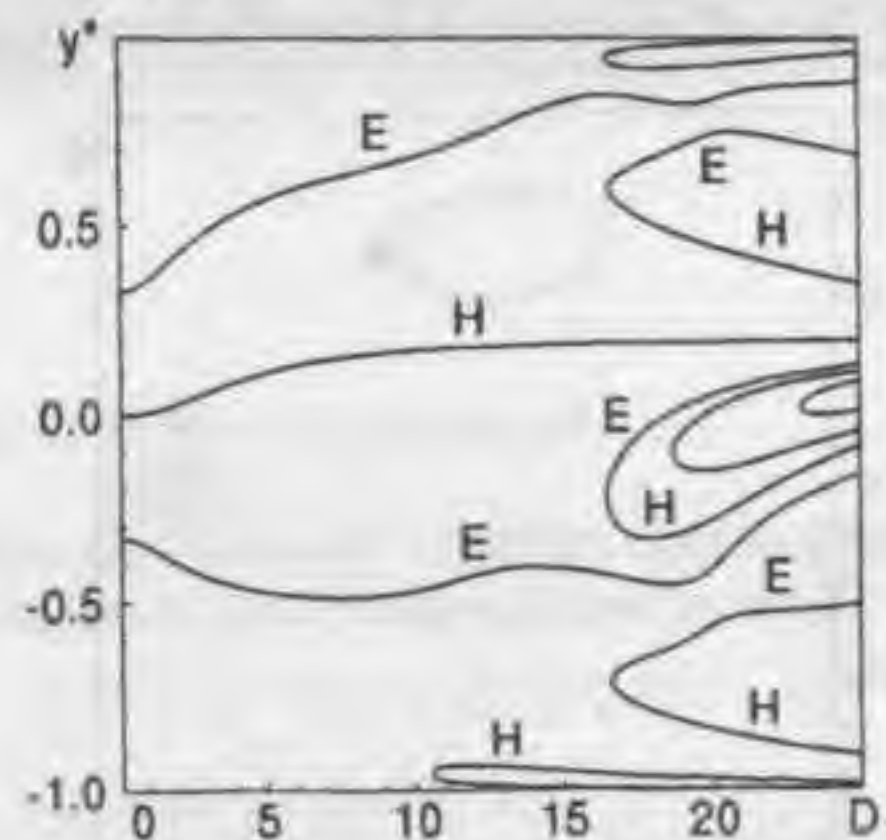


Рис.4. Біфуркаційна діаграма течії

рисунку суцільною лінією показано траєкторію періодичної точки, яка за один період руху границь повертається в своє початкове положення. Штриховими лініями на рисунку показано траєкторії точок A , B , C і D . Їх положення у момент $t = T$ позначено на рисунках відповідними буквами з індексом 1. Виділена рідина, що охоплює еліптичну періодичну точку, за один період руху границь не повертається в своє початкове положення, проте вершини квадрата знаходяться в безпосередній близькості до точки E .

На рис.5,б показано випадок адвекції виділеної рідини у вигляді квадрата $ABCD$, що охоплює гіперболічну періодичну точку H (0.80, 0.00) першого порядку при $D \approx 10.0$. Рисунок виконано в аналогічному стилі. Видно, що виділена рідина з часом витягнулася уздовж границь порожнини в довгу вузьку смужку, що свідчить про інтенсивний режим адвекції рідини.

Розглянемо процес адвекції рідини усередині прямокутної порожнини в полі швидкості, наведеному періодичним рухом границь при $D=10.0$. Виділимо в початковий момент об'єм A рідини, сформований регулярним перетином Пуанкаре біля еліптичної періодичної точки $E_1^{(1)}$ на рис.2,б. Одночасно виділимо малу кругову область B радіусу $R = 0.1$ з центром в точці (0.80, 0.00), яка відповідає гіперболічній періодичній точці першого порядку (рис.6,а).

Для визначення положень цих областей у фіксовані моменти часу достатньо прослідити за рухом контура, що обмежує виділені області рідини, використовуючи метод кускової сплайн-інтерполяції [6], який дозволяє сформулювати границі замкнутої області за впорядкованою послідовністю маркерів.

Результати чисельних розрахунків показують, що рідина A протягом кожного періоду повертається в своє початкове положення. З другого боку, виділена рідина B зміщується у бік

руху верхньої границі. Потім рідина B

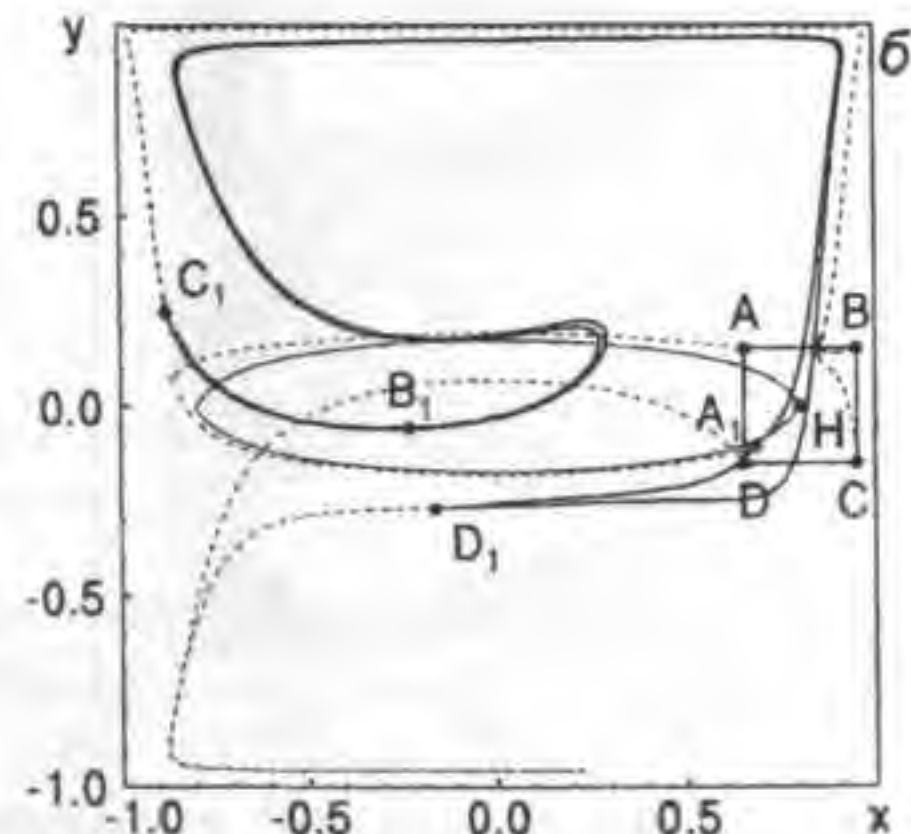
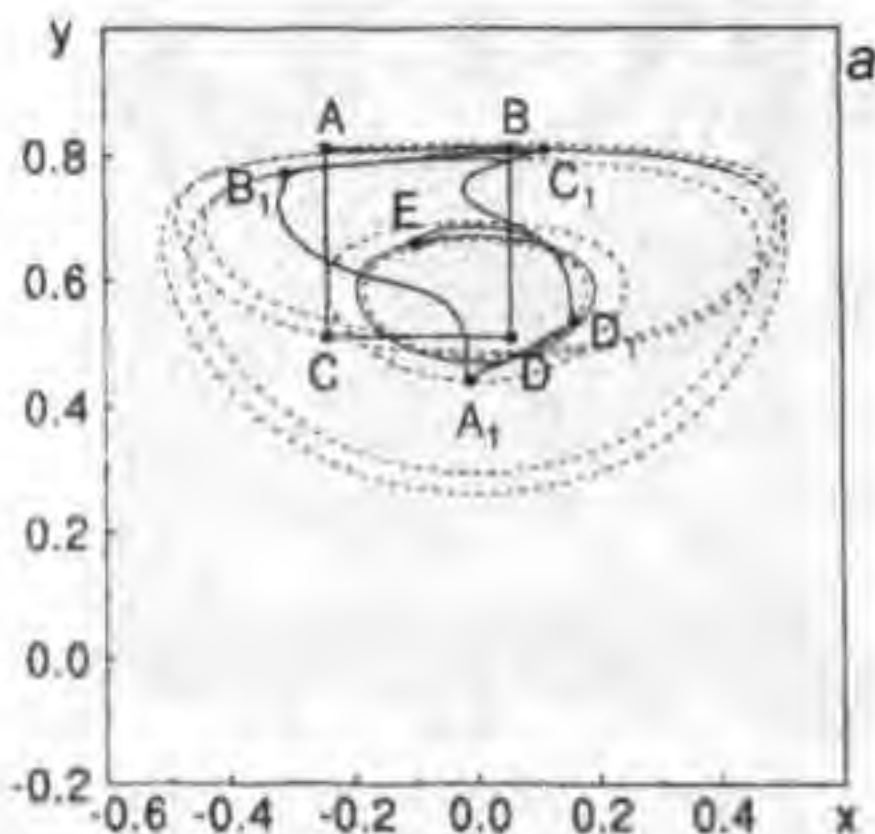


Рис.5. Адвекція квадратної області, що охоплює еліптичну (а) та гіперболічну (б) періодичні точки

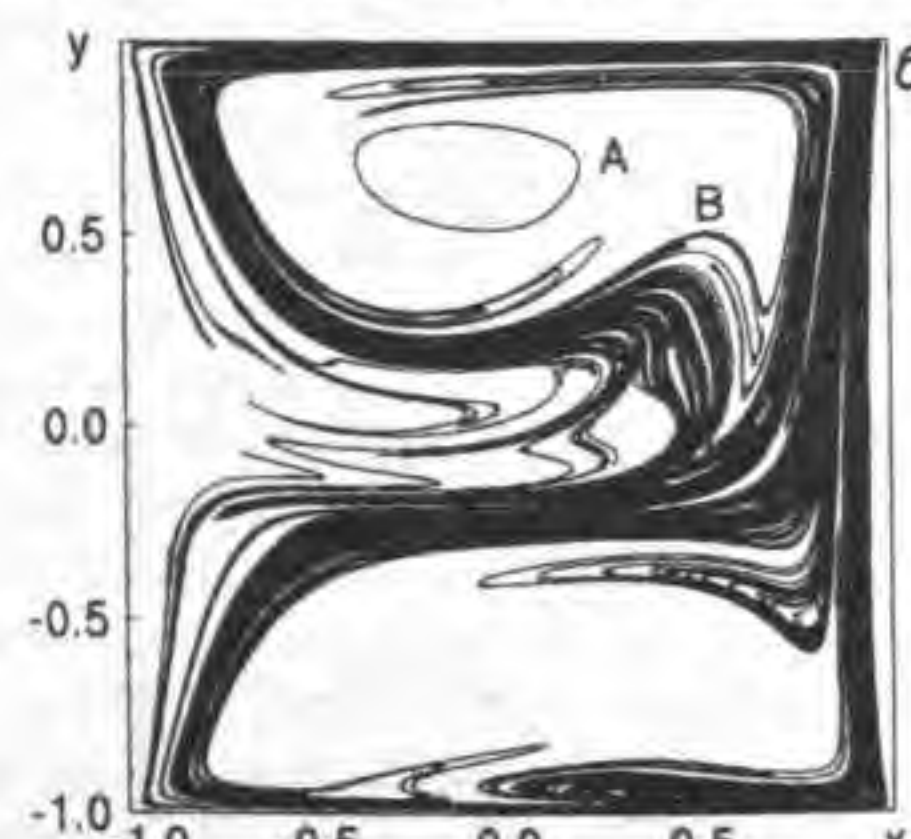
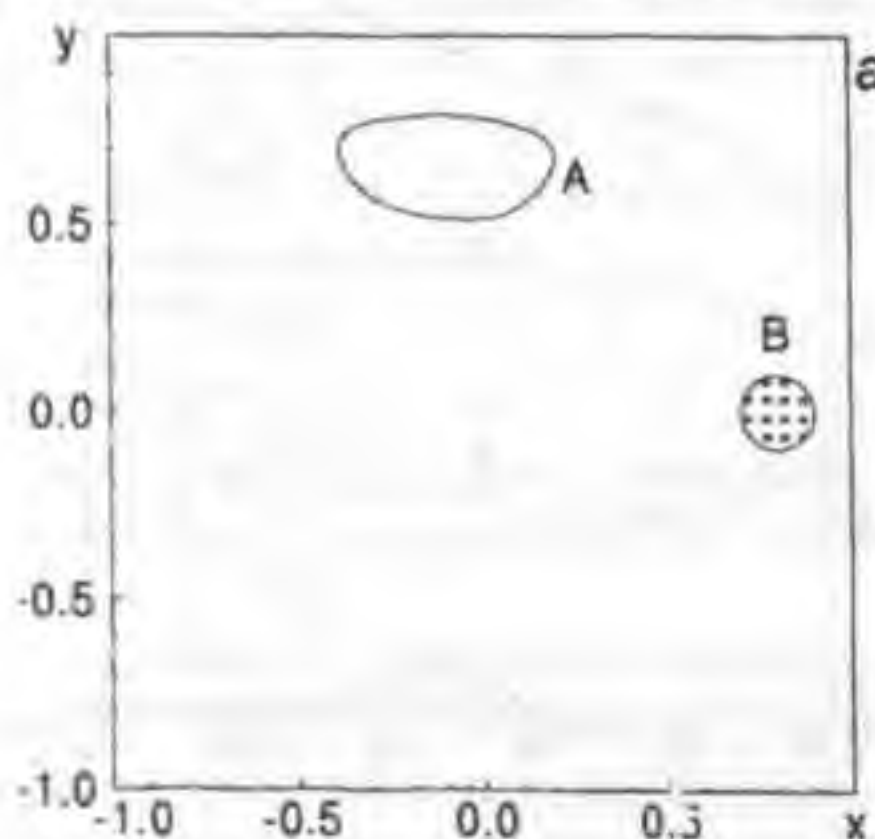


Рис.6. Адвекція виділених областей рідини в прямокутній порожнині: а) $t = 0$, б) $t = 8T$

переміщається до нижньої границі (рис.6.б).

Видно, що в даній течії мають місце одночасно інтенсивний (область B) і регулярний (область A) режими адвекції, викликані різним просторовим положенням періодичних точок течії різного типу.

Аналіз змін нормованих довжин контурів, що охоплюють виділені області течії, з часом для розглянутих раніше випадків показує, що контур області B збільшується в часі по експоненційному закону, що свідчить про інтенсивний режим адвекції [4].

Список використаних джерел

1. Stone H.A., Stroock A.D., Ajdari A. Engineering flows in small devices: Microfluidics toward a lab-on-a-chip // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 2004. – 36. – P.381-411.

2. Probstein R.F. Physicochemical hydrodynamics. – New York: Wiley, 1994. – 416 p.
3. Мелешко В.В., Гуржій О.А., Безим'яна Е.М. Електро-осмотичні течії в'язкої рідини в прямокутній порожнині // *Математичні методи та фізико-механічні поля.* – 2007. – 50, № 1. – С.107-116.
4. Ottino J.M. The kinematics of mixing: Stretching, chaos and transport. – Cambridge: Cambridge University Press, 1989. – 364 p.
5. Meleshko V.V., Peters G.W.M. Periodic points for two-dimensional Stokes flow // *Physics Letters.* – 1996. – A216. – P.87-96.
6. Гуржій О.А. Мелешко В.В., ван Хейст Г.Я.Ф. Метод кускової сплайн - інтерполяції в задачі про адвекцію пасивної домішки у відомому полі швидкості // *Доповіді НАН України.* – 1996. – № 8. – С.54-62.

Надійшла до редколегії 5.09.2010

УДК 517.9

Тетяна В. Добродзій, аспірант

Метод усереднення в задачах
оптимального керування на півосі.

В роботі обґрунтовано застосування методу усереднення до задач оптимального керування системами диференціальних рівнянь на півосі. Показано, що оптимальне керування усередненої задачі є ε -оптимальним для точної задачі.

Ключові слова: Оптимальне керування, метод усереднення, близькість критеріїв якості.

E-mail: notava@ukr.net

Статтю представив член редколегії академік НАН України Перестюк М.О.

1 Вступ

Ефективним методом розв'язання задач оптимального керування є метод усереднення. Вперше такий підхід був запропонований В.О.Плотніковим і отримав подальший розвиток в його спільно з учнями роботах (див., напр., [5], [6], [7]), а також в роботах інших авторів (див., напр., [1], [3]). При подальшому застосуванні даного методу до задач оптимального керування актуальним є питання обґрунтування відповідних результатів на півосі. При доведенні цих результатів використовується методика роботи [8] для обґрунтування методу усереднення на півосі для звичайних диференціальних рівнянь в стандартній формі.

2 Дослідження нелінійної задачі

2.1 Постановка задачі

Розглядається задачу оптимального керування

$$\dot{x} = \varepsilon X(t, x, u), \quad x(0) = x_0 \quad (1)$$

з критерієм якості $J(u) = \int_0^\infty L(t, x, u) dt \rightarrow \inf$,

де $\varepsilon > 0$ - малий параметр, $t \geq 0$, $x \in D$ - фазовий вектор, D - область R^n , $u \in U \subset R^m$ -

Tetiana V. Dobrodzii, PhD student

Averaging method in optimal control
problems on semiaxis.

In this article application of averaging method to the optimal control problems of differential equations' systems on semiaxis is proved. It is shown that optimal control of averaged problem is ε -optimal for precise problem.

Key Words: Optimal control, averaging method, proximity of performance criterions

вектор керування, X - n -мірна вектор-функція, а функція $L(t, x, u)$ задовольняє умову

$$|L(t, x, u) - L(t, y, u)| \leq \alpha(t)|x - y|, \quad (2)$$

причому $\int_0^\infty \alpha(t) dt < \infty$.

Керування $u(t)$ вважаються допустимими, якщо:

- a) $u(t)$ - вимірні, локально інтегровні при $t \geq 0$ і $u(t) \in U$ при $t \geq 0$;
- b) для керування $u(t)$ існує стала $u_0 \in U$, що $|u(t) - u_0| \leq \varphi(t)$, де $\varphi(t)$ - не залежить від u і $\int_0^\infty \varphi(t) dt < \infty$;
- c) для керування $u(t)$ існує $\varepsilon_0 > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ розв'язок задачі Коші (1) визначений та єдиний при $t \geq 0$;
- d) $|J(u)| < \infty$.

Множину допустимих керувань задачі (1) позначимо F .

Нехай існує границя

$$X_0(x, u) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} X(s, x, u) ds, \quad (3)$$

що не залежить від t та рівномірна відносно $t \geq 0$, $x \in D$ і $u \in U$. Поставимо у відповідність системі (1) при $t \geq 0$ наступну усереднену систему

$$\dot{y} = \varepsilon X_0(y, \bar{u}), \quad y(0) = x_0 \quad (4)$$

з функціоналом якості $\bar{J}(\bar{u}) = \int_0^\infty L(t, y, \bar{u}) dt$.

Допустимі керування усередненої системи $\bar{u}$ задовольняють тим же умовам, що і допустимі керування задачі (1), де умова *c*) виконується для розв'язку задачі Коші (4) і умова *d*) виконується для функціоналу $\bar{J}(\bar{u})$. Позначимо $J^* = \inf_{u(t) \in F} J(u)$, $\bar{J}^* = \inf_{\bar{u}(t) \in \bar{F}} \bar{J}(\bar{u})$.

Надалі будемо вважати, що для усередненої системи виконуються наступні умови:

(A1) Для довільної сталої $u_0 \in U$ розв'язок $\bar{y}(\tau) = \bar{y}(\tau, u_0)$ усередненої системи

$$\frac{d\bar{y}}{d\tau} = X_0(\bar{y}, u_0), \quad \bar{y}(0) = x_0, \quad \tau = \varepsilon t \quad (5)$$

визначений при всіх $\tau \geq 0$ і лежить в області D з деяким ρ - околom, де ρ не залежить від u_0 ;

(A2) розв'язок $\bar{y}(\tau)$ є рівномірно асимптотично стійким по τ_0 і u_0 .

2.2 Допоміжні твердження

Лема 1. . Нехай в області $Q = \{t \geq 0, x \in D \subset R^n, u \in U \subset R^m\}$ виконуються наступні умови:

1) $X(t, x, u)$ - неперервна за сукупністю змінних, обмежена і задовольняє умову Ліпшиця по x та u зі сталою M ;

2) рівномірно відносно $t \geq 0, x \in D$ і $u \in U$ існує границя (3);

3) виконуються умови (A1) та (A2).

Тоді для довільного $\eta > 0$ можна вказати таке $\varepsilon_0(\eta) > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ розв'язки задач Коші для точної системи (1) і усередненої системи (4) визначені при $t \geq 0$ і справедлива оцінка $|x(t, u) - y(t, u)| \leq \eta$ для кожного керування $u(t)$, що задовольняють умови *a*) і *b*).

Доведення. Оскільки розв'язок $\bar{y}(\tau, u_0)$ усередненої системи (5) є рівномірно асимптотично стійким, то для довільного $\eta > 0$ існують $\delta(\eta) > 0$ і $T(\delta) \geq 0$, що для довільного іншого розв'язок $\bar{y}_1(\tau, u_0)$ системи (5) із нерівності

$$|\bar{y}(\tau_0, u_0) - \bar{y}_1(\tau_0, u_0)| < \delta \quad (6)$$

випливає виконання нерівностей

$$|\bar{y}(\tau, u_0) - \bar{y}_1(\tau, u_0)| < \frac{\eta}{8} \quad \text{при } \tau \geq \tau_0 \quad (7)$$

і $|\bar{y}(\tau, u_0) - \bar{y}_1(\tau, u_0)| < \frac{\delta}{8}$ при $\tau \geq \tau_0 + T$, де δ не залежить від τ_0 і u_0 .

При цьому можемо вважати, що $\delta < \eta < \rho$. Враховуючи рівномірність по t границі (3), в силу леми 1 із [4] існує $\varepsilon_1 > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_1$ для довільного $\tau \in [\tau_0, \tau_0 + T]$ отримаємо:

$$|\bar{y}(\tau, u_0) - y(\frac{\tau}{\varepsilon}, u(\frac{\tau}{\varepsilon}))| < \frac{\delta}{8}, \quad (8)$$

де $y(\frac{\tau}{\varepsilon}, u(\frac{\tau}{\varepsilon}))$ - розв'язок системи (4) з $u(t)$, що задовольняє умовам *a*) і *b*). Розглянемо такий розв'язок $\bar{y}_T(\tau, u_0)$ системи (5), що $\bar{y}_T(T, u_0) = y(\frac{T}{\varepsilon}, u(\frac{T}{\varepsilon}))$. Оскільки $\bar{y}(\tau, u_0)$ - рівномірно асимптотично стійкий, то, враховуючи нерівність $|\bar{y}(T, u_0) - \bar{y}_T(T, u_0)| < \frac{\delta}{8}$, отримаємо нерівність $|\bar{y}(\tau, u_0) - \bar{y}_T(\tau, u_0)| < \frac{\eta}{8}$ при $\tau \geq T$ і $|\bar{y}(2T, u_0) - \bar{y}_T(2T, u_0)| < \frac{\delta}{8}$. Тоді при $\tau \in [T, 2T]$ отримаємо оцінку

$$|y(\frac{\tau}{\varepsilon}, u(\frac{\tau}{\varepsilon})) - \bar{y}(\tau, u_0)| < \frac{\eta}{4}, \quad (9)$$

а при $\tau = 2T$ маємо

$$|y(\frac{2T}{\varepsilon}, u(\frac{2T}{\varepsilon})) - \bar{y}(2T, u_0)| < \frac{\delta}{4}. \quad (10)$$

Продовжуючи далі цей процес, отримуємо оцінку $|y(\frac{\tau}{\varepsilon}, u(\frac{\tau}{\varepsilon})) - \bar{y}(\tau, u_0)| < \frac{\eta}{4}$ для довільного $\tau \geq 0$ і довільного $u(t)$, що задовольняють умовам *a*) і *b*).

Враховуючи лему 1 [4] і рівномірність відносно $t \geq 0$ границі (3), маємо, що за вказаними δ і T можна знайти таке $\varepsilon_2(\delta, T)$, що при $\varepsilon < \varepsilon_2$ на відрізку $[\tau_0, \tau_0 + T]$ розв'язок $x(\frac{\tau}{\varepsilon}, u(\frac{\tau}{\varepsilon}))$ системи (1) визначений, лежить в області D і задовольняє нерівність

$$|x(\frac{\tau}{\varepsilon}, u) - y(\frac{\tau}{\varepsilon}, u)| < \frac{\delta}{8}, \quad \tau \in [\tau_0, \tau_0 + T]. \quad (11)$$

Розглянемо розв'язок $\bar{y}_T(\tau, u_0)$ усередненої системи (5) такий, що $\bar{y}_T(T, u_0) = x(\frac{T}{\varepsilon}, u(\frac{T}{\varepsilon}))$ і розв'язок $\bar{x}_T(\frac{\tau}{\varepsilon}, u_0)$ системи

$$\frac{d\bar{x}}{d\tau} = X(\frac{\tau}{\varepsilon}, \bar{x}, u_0), \quad \bar{x}(0) = x_0,$$

такий, що $\bar{x}_T(\frac{T}{\varepsilon}, u_0) = x(\frac{T}{\varepsilon}, u(\frac{T}{\varepsilon}))$. Із першої теореми М.М.Боголюбова маємо нерівність

$$|\bar{x}_T(\frac{\tau}{\varepsilon}, u_0) - \bar{y}_T(\tau, u_0)| < \frac{\delta}{8}, \quad \tau \in [T, 2T], \quad (12)$$

а згідно леми 1 [4] існує $\varepsilon_3 > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_3$ справедлива оцінка

$$|x(\frac{\tau}{\varepsilon}, u) - \bar{x}_T(\frac{\tau}{\varepsilon}, u_0)| < \frac{\delta}{8}, \quad \tau \in [T, 2T]. \quad (13)$$

Із (8) і (11) при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, де $\varepsilon_0 = \min\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3\}$ випливає, що

$|x(\frac{T}{\varepsilon}, u) - \bar{y}(T, u_0)| \leq |x(\frac{T}{\varepsilon}, u) - y(\frac{T}{\varepsilon}, u)| + |y(\frac{T}{\varepsilon}, u) - \bar{y}(T, u_0)| < \frac{\delta}{4}$, і таким чином, при $\tau = T$ справедлива нерівність

$$|\bar{y}_T(T, u_0) - \bar{y}(T, u_0)| < \frac{\delta}{4}. \quad (14)$$

Тоді із рівномірної асимптотичної стійкості розв'язку $\bar{y}(\tau, u_0)$ випливає виконання нерівностей

$$|\bar{y}_T(\tau, u_0) - \bar{y}(\tau, u_0)| < \frac{\eta}{8} \text{ при } \tau \geq T, \quad (15)$$

$$|\bar{y}_T(\tau, u_0) - \bar{y}(\tau, u_0)| < \frac{\delta}{8} \text{ при } \tau \geq 2T. \quad (16)$$

Таким чином, із оцінок (9), (12), (13) і (15) при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ і $\tau \in [T, 2T]$ маємо, що

$$|x(\frac{\tau}{\varepsilon}, u) - y(\frac{\tau}{\varepsilon}, u)| < \eta,$$

а при $\tau = 2T$, враховуючи (10) і (16), отримаємо нерівність

$$|x(\frac{2T}{\varepsilon}, u(\frac{2T}{\varepsilon})) - y(\frac{2T}{\varepsilon}, u(\frac{2T}{\varepsilon}))| < \frac{5\delta}{8}. \quad (17)$$

Із нерівності (10) і (17) також отримаємо, що

$$|x(\frac{2T}{\varepsilon}, u(\frac{2T}{\varepsilon})) - \bar{y}(2T, u_0)| < \frac{7\delta}{8}.$$

Таким чином маємо, що розв'язок $x(\frac{\tau}{\varepsilon}, u)$, що лежить при $\tau = T$ в δ -околі розв'язку $\bar{y}(\tau, u_0)$, не виходячи при $\tau \in [T, 2T]$ з його η -околу, при $\tau = 2T$ знову потрапляє в його δ -оکیل. Останнє дозволяє продовжувати дану процедуру на відрізок $[2T, 3T]$ і т.д., звідки і отримуємо доведення лема 1.

2.3 Основний результат

Теорема 2.1. . Нехай в області $Q = \{t \geq 0, x \in D \subset R^n, u \in U \subset R^m\}$ виконуються умови лема 1 та існує оптимальне керування $\bar{u}^*$ усередненої задачі (4). Тоді для довільного $\eta > 0$ існує $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\eta) > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ $J^* > -\infty$ і виконується нерівність

$$|J(\bar{u}^*) - J^*| \leq \eta. \quad (18)$$

Доведення. Множина допустимих керувань точної системи непорожня. Покажемо, що $J^* = J_\varepsilon^* = \inf_{u(t) \in F} J(u) > -\infty$. Доведення від супротивного. Нехай існує послідовність $\{\varepsilon_n\}$, що $\varepsilon_n \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$, а

$$J_{\varepsilon_n}^* = -\infty. \quad (19)$$

Для кожного ε_n за означенням інфімуму існує послідовність допустимих керувань u_m^n , що

$$J_{\varepsilon_n}(u_m^n) \rightarrow -\infty \text{ при } m \rightarrow \infty. \quad (20)$$

Позначимо $x_m^n = x(t, u_m^n)$ - розв'язок системи (1) при керуваннях u_m^n , $y_m^n = y(t, u_m^n)$ - розв'язок системи (4) при керуваннях u_m^n є допустимими і для усередненої системи. Для кожного ε існує оптимальне керування усередненої задачі (4). Тоді $\bar{J}_{\varepsilon_n}(u_m^n) > \bar{J}_{\varepsilon_n}^* > -\infty$, де $\bar{J}_{\varepsilon_n}(u_m^n) = \int_0^\infty L(t, y_m^n, u_m^n) dt$. Зафіксуємо деяке $0 < \eta_0 < \frac{\rho}{2}$. Із лема 1 слідує існування натурального n_0 , що для $\varepsilon_n < \varepsilon_{n_0}$ справедливі оцінки $|J_{\varepsilon_n}(u_m^n) - \bar{J}_{\varepsilon_n}(u_m^n)| = |\int_0^\infty L(t, x_m^n, u_m^n) dt - \int_0^\infty L(t, y_m^n, u_m^n) dt| \leq \eta_0 \int_0^\infty \alpha(t) dt = \eta_0 \tilde{C}$, де $\tilde{C} > 0$. Звідси отримуємо, що $J_{\varepsilon_n}(u_m^n) > \bar{J}_{\varepsilon_n}^* - \tilde{C}\eta_0$, що приводить до протиріччя з (20), а тому і з (19).

Доведемо тепер оцінку (18), $\eta_1 = \frac{\eta}{2\tilde{C}+1}$. В силу лема 1 для даного η_1 існує $\varepsilon_1(\eta_1)$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_1$ справедлива наступна нерівність

$$|J(\bar{u}^*(t)) - \bar{J}(\bar{u}^*(t))| \leq \eta_1 \tilde{C}, \quad (21)$$

де $\bar{x}(t)$ - розв'язок задачі (1) при $u = \bar{u}^*(t)$, $\bar{y}^*(t)$ - оптимальна траєкторія усередненої системи (4). Тоді

$$J^* \leq J(\bar{u}^*(t)) \leq \bar{J}^* + \eta_1 \tilde{C}. \quad (22)$$

Із означення інфімуму отримуємо, що для вибраного $\eta_1 > 0$ існує допустиме керування $u_{\eta_1}(t)$, що виконується нерівність $J(u_{\eta_1}) < J^* + \eta_1$. Із останнього отримуємо оцінку $\bar{J}^* = \bar{J}^*(\bar{u}^*) \leq \bar{J}(u_{\eta_1}) \leq \bar{J}(u_{\eta_1}) + J^* + \eta_1 - J(u_{\eta_1})$. Оцінимо аналогічно (21) різницю $|\bar{J}(u_{\eta_1}) - J(u_{\eta_1})| \leq \eta_1 \tilde{C}$. Тому $\bar{J}^* \leq J^* + (\tilde{C} + 1)\eta_1$, а звідси, враховуючи (22), отримуємо $|J^* - \bar{J}^*| \leq (\tilde{C} + 1)\eta_1$. Тоді, використовуючи (21), маємо, що $|J(\bar{u}^*) - J^*| \leq |J(\bar{u}^*) - \bar{J}^*| + |\bar{J}^* - J^*| \leq \eta$, звідки і отримуємо доведення теореми.

3 Лінійна за керуванням задача

3.1 Постановка задачі, основні означення.

Розглядається задача

$$\dot{x} = \varepsilon[A(t, x) + B(t, x)u], \quad x(0) = x_0 \quad (23)$$

з критерієм якості

$J(u) = \int_0^\infty [C(t, x) + F(t, u)] dt \rightarrow \inf$, де $\varepsilon > 0$ - малий параметр, $t \geq 0$, $x \in D$ - фазовий вектор, D - обмежена, замкнена область в R^n , $u \in U \subset R^m$ - вектор керування, U - опукла, замкнена множина, $0 \in U$, A - вектор-функція, B - $n \times m$ матриця. Функцію $F(t, u)$ будемо вважати опуклою по u для довільного фіксованого t , напівніперервна знизу по u і такою, що існує $a > 0$, $p > 1$, для яких $F(t, u) \geq a|u|^p$ і для деякого $K > 0$: $\int_0^\infty F(t, 0) dt \leq K$.

Будемо вважати, що виконуються умови:

1) Існують такі $A_0(x)$ і $B_0(x)$, що рівномірно по $x \in D$ та $t \geq 0$ справедливі наступні граничні співвідношення:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{T} \int_t^{t+T} A(t, x) dt - A_0(x) \right| = 0,$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \|B(t, x) - B_0(x)\|^q dt = 0,$$

де q визначаються з умов $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$;

2) $A(t, x)$, $B(t, x)$, $C(t, x)$ - визначені і неперервні при $t \geq 0$, $x \in D$;

3) $A(t, x)$, $B(t, x)$ - обмежені сталою M при $t \geq 0$, $x \in D$, $C(t, x) \geq 0$ при $t \geq 0$, $x \in D$, та існує $y \in D$, що $\int_0^\infty C(t, y) dt < \infty$;

4) $A(t, x)$, $B(t, x)$ - ліпшицеві по x зі сталою L в області D , а для $C(t, x)$ виконується нерівність $|C(t, x) - C(t, y)| \leq \alpha(t)|x - y|$, де $\int_0^\infty \alpha(t) dt < \infty$ при $t \geq 0$, $x \in D$, $y \in D$.

Керування $u(t)$ допустимими, якщо

$a_1) u(t) \in L_p(0, \infty)$;

$b_1) u(t) \in U$ майже при всіх $t \geq 0$;

$c_1)$ існує $\varepsilon_0 > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ розв'язок задачі Коші (23) $x(t, u)$ визначений і єдиний при $t \geq 0$ та лежить в області D ;

$d_1) J(u) < \infty$.

Множину таких керувань $u(t)$ позначимо Ω .

Поставимо у відповідність задачі (23) при $t \geq 0$ наступну усереднену задачу:

$$\dot{y} = \varepsilon[A_0(y) + B_0(y)\bar{u}], \quad y(0) = x_0 \quad (24)$$

з критерієм якості

$$\bar{J}(\bar{u}) = \int_0^\infty [C(t, y) + F(t, \bar{u})] dt, \quad \text{де допустимі}$$

керування усередненої системи задовольняють ті ж умови, що і допустимі керування точної задачі (23), причому умови $c_1)$ і $d_1)$ справедливі для розв'язків усередненої задачі. Множину таких керувань позначимо $\bar{\Omega}$ та $J^* = \inf_{u(t) \in \Omega} J(u)$,

$$\bar{J}^* = \inf_{\bar{u}(t) \in \bar{\Omega}} \bar{J}(\bar{u}).$$

Надалі вважаємо, що для усередненої системи виконується наступна умова:

(A3) Якщо на деякій множині керувань, що задовольняють $a_1)$ і $b_1)$, виконується оцінка

$$\int_0^\infty |u(t)|^p dt \leq C_1, \quad (25)$$

то:

1) існує $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(C_1)$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ розв'язок усередненої задачі $y(t, u)$ лежить при $t \geq 0$ в області D з деяким ρ -околом, причому ρ не залежить від ε і від u ;

2) $y(t, u)$ рівномірно асимптотично стійкий відносно t_0 , ε , $y_{t_0}^1$ і u з даної множини.

3.2 Допоміжні результати

Лема 2. При виконанні умов 1)-4) і умови (A3) для довільного $\eta > 0$ існує $\varepsilon_0(\eta, C_1) > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ розв'язок $x(t, u)$ точної системи (23) визначений при $t \geq 0$, і справедлива оцінка $|x(t, u) - y(t, u)| \leq \eta$ для кожного допустимого керування $u(t)$, що задовольняє умову (A3), де $y(t, u)$ - розв'язок усередненої системи (24).

Доведення. Розглянемо розв'язок $y(t) = y(t, u)$ усередненої системи (24). Для довільного $\eta > 0$ існують $\delta = \delta(\eta, C_1) > 0$ і $T(\delta) \geq 0$, що для довільного іншого розв'язок $y_1(t, u)$ системи (24) з нерівності $|y(t_0, u) - y_1(t_0, u)| < \delta$ слідує виконання нерівностей $|y(t, u) - y_1(t, u)| < \frac{\eta}{2}$ при $t \geq t_0$ і $|y(t, u) - y_1(t, u)| < \frac{\delta}{2}$ при $t \geq t_0 + T$. Нехай $\delta < \eta < \rho$. оскільки в умові 1) граничні співвідношення рівномірні по $t \geq 0$, то в силу леми 2.1 [2] маємо, що за вказаними $\delta > 0$ і $T > 0$ можна знайти таке $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\delta, T)$, для якого справедлива оцінка $|x(t, u) - y(t, u)| < \frac{\delta}{2}$ при $t \in [t_0, t_0 + T]$. Розглянемо такий розв'язок $y_T(t, u)$ системи (24), що $y_T(T, u(T)) = x(T, u(T))$. Так як $|x(T, u) - y(T, u)| < \frac{\delta}{2}$ при $t = T$, то справедлива нерівність $|y_T(T, u) - y(T, u)| < \frac{\delta}{2}$. Враховуючи те, що розв'язок $y(t, u)$ - рівномірно асимптотично стійкий, маємо при

$t \geq T$ нерівність

$$|y_T(t, u) - y(t, u)| < \frac{\eta}{2}, \quad (26)$$

$$|y_T(2T, u) - y(2T, u)| < \frac{\delta}{2}. \quad (27)$$

Оскільки $y(t, u)$ лежить в області D з ρ -околом, то $y_T(t, u)$ також лежить в області D з $\frac{\rho}{2}$ -околом. Згідно леми 2.1 [2] справедлива нерівність

$$|x(t, u) - y_T(t, u)| < \frac{\delta}{2} \quad \text{при} \quad t \in [T, 2T], \quad \varepsilon \leq \varepsilon_0. \quad (28)$$

Враховуючи (26) і (28), оцінимо різницю $|x(t, u) - y(t, u)| \leq |x(t, u) - y_T(t, u)| + |y_T(t, u) - y(t, u)| < \frac{\delta}{2} + \frac{\eta}{2} < \eta$, $t \in [T, 2T]$ і при $t = T$, враховуючи (27) і (28), маємо, що $|x(2T, u) - y(2T, u)| < \delta$. Таким чином, розв'язок $x(t, u)$, що лежить при $t = T$ в δ -околі розв'язку $y(t, u)$, не виходячи при $t \in [T, 2T]$ із його η -околу, при $t = 2T$ знову потрапляє в його δ -оکیل. Продовжуючи аналогічні міркування далі, отримуємо такі ж оцінки на відрізках $[2T, 3T]$ і т.д., звідки і випливає доведення.

3.3 Основні результати

Теорема 3.1. Нехай виконуються умови 1)-4) та умова (A3). Тоді існує $\varepsilon_0 > 0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ точна та усереднена задачі мають розв'язки, і для довільного $\eta > 0$ існує $0 < \varepsilon_1 = \varepsilon_1(\eta) < \varepsilon_0$, що при $0 < \varepsilon < \varepsilon_1$ справедлива оцінка $|J^* - J(\bar{u}^*)| \leq \eta$, де $\bar{u}^*$ - оптимальне керування усередненою задачею.

Доведення. Розглянемо $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$, де ε_0 вибирається з умов c_1 і d_1 для точної та усередненої систем. Оскільки $J(u) \geq 0$, то існує невід'ємна нижня межа m для $J(u)$. Нехай $u_n(t)$ - послідовність допустимих керувань, таких що відповідна послідовність $J(u_n)$ монотонно прямує до m при $n \rightarrow \infty$. В силу умов на C і F маємо оцінку $a \int_0^\infty |u_n(t)|^p dt \leq m + 1$, із якої слідує виконання перівностей

$$\int_0^\infty |u_n(t)|^p dt \leq \frac{m+1}{a}, \quad (29)$$

для умови (A3) при $C_1 = \frac{m+1}{a}$. Розглянемо тепер множину $\mathcal{K}$ функцій u , що задовольняють умовам a_1 , b_1 і (29). $\mathcal{K}$ - слабо компактна множина, тому з послідовності допустимих керувань $\{u_n(t)\} \subset \mathcal{K}$ можна виділити слабо

збіжну підпослідовність $\{u_{n_k}(t)\}$ до $u^*(t) \in \mathcal{K}$. Не втрачаючи загальності, можна вважати, що сама $u_n(t)$ слабо збіжна. Оскільки $u_n(t)$ - допустимі керування, то $x_n(t) = x(t, u_n(t))$ визначені при $t \geq 0$ і лежать в області D для довільного $n \geq 1$ і $\varepsilon > 0$. При довільному $T \geq 0$ для $x_n(t)$ маємо рівномірну оцінку $|x_n(t)| \leq |x_0| + \varepsilon MT + \varepsilon MT^{\frac{1}{q}} \left(\int_0^t |u_n(s)|^p ds \right)^{\frac{1}{p}} \leq$

C_2 при $t \in [0, T]$. Рівностепенева неперервність функцій $x_n(t)$ при $t \geq 0$ слідує з нерівності $|x_n(t_2) - x_n(t_1)| \leq \varepsilon M|t_2 - t_1| + \varepsilon MC_1^{\frac{1}{p}}|t_2 - t_1|^{\frac{1}{q}}$. Тому послідовність $\{x_n(t)\}$ - компактна на $[0, T]$ при довільному $T \geq 0$, з неї можна виділити підпослідовність (також позначену $\{x_n(t)\}$), яка рівномірно при $t \in [0, T]$ збігалась би до $x^*(t)$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n(t) = x^*(t) \quad \text{при} \quad t \in [0, T]. \quad (30)$$

Покажемо, що $x^*(t)$ - розв'язок задачі Коші (23), що відповідає $u^*(t)$. Використаємо

граничне співвідношення $\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T |A(s, x_n(s)) -$

$A(s, x^*(s))| ds = 0$ і $\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^t B(s, x^*(s)) [u_n(s) - u^*(s)] ds = 0$, виконане в силу слабкої збіжності $u_n(t)$ до $u^*(t)$ при $t \in [0, T]$ для довільного $T \geq 0$. Враховуючи умову Ліпшиця, отримуємо

$$\varepsilon \int_0^t |B(s, x_n(s)) - B(s, x^*(s))| u_n(s) ds \leq \leq \varepsilon LC_1^{\frac{1}{p}} \left(\int_0^t |x_n(s) - x^*(s)|^q ds \right)^{\frac{1}{q}},$$

звідки в силу (30) маємо, що

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T |B(s, x_n(s)) - B(s, x^*(s))| |u_n(s)| ds = 0.$$

Відповідно,

$$x^*(t) = x_0 + \varepsilon \int_0^t [A(s, x^*) + B(s, x^*) u^*] ds \quad (31)$$

при $t \in [0, T]$, звідки отримуємо, що $x^*(t)$ - розв'язок, який відповідає керуванню $u^*(t)$ при $t \in [0, T]$. В силу довільності вибору T і єдиності розв'язку, маємо, що співвідношення (31) виконується при довільному $t \geq 0$.

Розглянемо

$$J(u_n) = \int_0^\infty [C(t, x_n(t)) + F(t, u_n(t))] dt. \text{ Нехай}$$

$$J_1(u_n) = \int_0^\infty F(t, u_n(t)) dt. \text{ Оскільки } F - \text{опукла}$$

по u і напівноперервна знизу по u , то J_1 є слабо напівноперервним знизу функціоналом. Враховуючи, що $|C(t, x_n)| \leq |C(t, x_n) - C(t, y)| + C(t, y) \leq 2K_2\alpha(t) + C(t, y)$, де K_2 - радіус кулі, що покриває область D , за теоремою Лебега про мажоруючу збіжність і напівноперервність знизу $J_1(u_n)$ маємо

$$\lim_{n \rightarrow \infty} J(u_n) \geq \int_0^\infty [C(t, x^*(t)) + F(t, u^*(t))] dt = J(u^*).$$

Тому $J(u^*) \leq \lim_{n \rightarrow \infty} J(u_n) = m$, звідки $J(u^*) = m$ і $u^*(t)$ є оптимальним керуванням задачі (23). Аналогічно доводиться існування оптимального керування усередненої задачі.

Оцінемо різницю $|J^* - J(\bar{u}^*)|$. Справедлива наступна оцінка

$$|x^*(t, \bar{u}^*) - y^*(t, \bar{u}^*)| \leq \eta_1 \text{ при } \varepsilon < \varepsilon_0, \quad (32)$$

де $\eta_1 = \frac{\eta}{2C_1}$, $\widetilde{C}_1 = \int_0^\infty \alpha(t) dt$. Обмеженість функціонала $J(\bar{u}^*)$ слідує з оцінок $J(\bar{u}^*) \leq |\bar{J}^*| + |\bar{J}^* - J(\bar{u}^*)|$ и

$$|\bar{J}^* - J(\bar{u}^*)| \leq \eta_1 \int_0^\infty \alpha(t) dt \leq \eta_1 \widetilde{C}_1. \quad (33)$$

Аналогічно оцінюється різниця

$$|J^* - \bar{J}(u^*)| \leq \eta_1 \widetilde{C}_1. \quad (34)$$

Оскільки u^* - оптимальне керування точної системи, а $\bar{u}^*$ - оптимальне керування усередненої системи, то справедливі нерівності

$$J(\bar{u}^*) \leq J^*, \quad \bar{J}(u^*) \leq \bar{J}^*. \quad (35)$$

Для J^* і $\bar{J}^*$ виконується одна з нерівностей

$$J^* > \bar{J}^* \quad (36)$$

або

$$J^* \leq \bar{J}^* \quad (37)$$

В першому випадку з (35), (36) і (33) отримуємо нерівність $J(\bar{u}^*) \geq J^* > \bar{J}^* \geq J(\bar{u}^*) - \eta_1 \widetilde{C}_1$, а звідси $|J^* - \bar{J}^*| \leq \eta_1 \widetilde{C}_1$.

В другому випадку з (35), (37) і (34) маємо $\bar{J}(u^*) \geq \bar{J}^* \geq J^* \geq \bar{J}(u^*) - \eta_1 \widetilde{C}_1$, звідки $|J^* - \bar{J}^*| \leq \eta_1 \widetilde{C}_1$. Таким чином, отримуємо наступну оцінку $|J^* - J(\bar{u}^*)| \leq |J^* - \bar{J}^*| + |\bar{J}^* - J(\bar{u}^*)| \leq \eta$.

Теорема доведена.

4 Висновки

Отже, в роботі отримані твердження про близькість на півосі розв'язків точних і відповідних усереднених систем в нелінійному випадку і у випадку лінійних за керуванням задач.

Список використаних джерел

1. Гайцгори В. Г. Управление системами с быстрыми и медленными движениями. - М.: Наука, 1991. - 224 с.
2. Добродзій Т.В. Дослідження задач оптимального керування системами диференціальних рівнянь, лінійних по керуванню, методом усереднення // Український математичний вісник. - 2009. - Т.6. - №2. - С. 150 - 172.
3. Моисеев Н.Н. Асимптотические методы нелинейной механики. - М.: Наука, 1981. - 400 с.
4. Носенко Т.В., Станьжицкий О.М. Метод усреднения в деяких задачах оптимального керування // Нелінійні коливання. - 2008. - Т.11. - №4. - С. 512 - 519.
5. Плотников В.А. Метод усреднения в задачах управления. - К.:Одесса:Лыбидь,1992. -188 с.
6. Плотников В.А., Бойцова И.А. Усреднение в задачах оптимального управления системами с быстрыми и медленными переменными // Проблемы управления и информатики. - 2000. - №5. - С. 152 - 156.
7. Плотников В.А., Плотников А.В., Витюк А.Н. Дифференциальные уравнения с многозначной правой частью. Асимптотические методы. - Одесса:Астропринт, 1999. - 354 с.
8. Самоїленко А. М., Станьжицкий А.Н. Об усреднении дифференциальных уравнений на бесконечном интервале // Дифференц. уравнения. - 2006. - 42, № 4. - С. 476 - 482.

Надійшла до редколегії 15.09.2010

УДК 534.1:519.6

Богдан П. Ковальчук, аспірант

**Вплив рідинного наповнення на рух
циліндричного резервуару на
маятниковому підвісі**

Досліджується траєкторія руху резервуару на маятниковому підвісі при різних співвідношеннях маси рідини і резервуару. Система збуджується моментом з круговим годографом, що приводить до режиму руху на вільній поверхні типу кругової хвилі. Показано, що при малих відносних масах рідини система рухається із постійним зростанням розмаху траєкторії, проте для великих відносних мас рідини розмах траєкторії з часом зменшується і траєкторія втрачає монотонний характер зміни. Одержані результати порівнюються з випадком поступального руху резервуара. Зазначено, що спостерігається помітна аналогія в розвитку процесів за винятком систематичного утону системи від початкового положення, що зумовлене специфікою маятникового підвісу.

Ключові слова: динаміка рідини з вільною поверхнею, маятниковий підвіс, траєкторія руху резервуару.

Bogdan P. Kovalchuk, PhD student

**Liquid filling effect on motion of
cylindrical reservoir on pendulum
suspension**

We investigate trajectory of motion of a reservoir on pendulum suspension for different ratio of masses of reservoir and liquid. The system is excited by moment with circular hodo-graph, which results in circular mode of motion of a liquid free surface. It was shown that for small relative mass of liquid the system moves with permanent increase of trajectory amplitude, however, for great relative masses of liquid amplitude of trajectory decreases in time and its variation loses monotonic character. The obtained results are compared with the case of translational motion of the reservoir. It was noted, that evident analogy in development of processes is observed, besides systematic drift of the system from the initial position, which is caused by specificity of pendulum suspension.

Key Words: dynamics of liquid with a free surface, pendulum suspension, trajectory of reservoir motion.

E-mail: BogdanKovalchuk@gmail.com

Статтю представила кафедра механіки суцільних середовищ

1 Вступ

Задача про кругову хвилю на вільній поверхні рідини в резервуарі є однією з найбільш цікавих задач, які демонструють складність розвитку нелінійних процесів в задачах про рух рідини з вільною поверхнею в рухомому резервуарі. Ця задача вперше була досліджена ще в роботах [1-3]. В цих роботах задача про кругову хвилю розглядалася виключно як задача про втрату стійкості плоскої форми руху рідини в резервуарі, який виконує коливальний односпрямований рух, і можливість переходу до руху у формі стійкої кругової хвилі. Різні аспекти задачі про кругову хвилю були досліджені в роботі [4], де для опису руху на вільній по-

верхні рідини було запропоновано спеціальний тип функцій. В роботі [5] було використано опис типу "амплітуда-фаза" для моделювання кругової хвилі і було досліджено умови існування кругової хвилі в резервуарі з пружними стінками. Проте в цих роботах досліджується лише два граничних усталених стани: плоска форма руху рідини і її стійкість, а потім вже форма руху типу кругової хвилі в усталеному русі. Тобто, дослідження фаз переходу від плоскої форми руху на вільній поверхні рідини до форми типу кругової хвилі і навпаки в цих роботах були відсутні. При цьому математична модель в цих дослідженнях включала від двох до п'яти форм коливань. Рух резервуару вважався заданим.

Дослідженню перехідних режимів руху ре-

зервуара з рідиною, які приводять до зародження кругової хвилі присвячені дослідження, виконані в роботі [6]. При цьому розглядається скінченно вимірний модель з урахуванням дванадцяти форм коливань, включаючи кратні форми в радіальному напрямку. Збудження руху відбувається силою з круговим годографом:

$$F_x = F_0 \cos \omega t; F_y = F_0 \sin \omega t$$

Рух резервуару з рідиною відбувається як сумісний і закон руху в часі визначається. Було встановлено, що при частотах збуджувальної сили, віддалених від першої резонансної частоти, зароджується кругова хвиля, яка має односпрямований характер. Проте при наближенні частоти зміни сили до першої резонансної частоти спостерігаються режими, коли в окремі моменти часу кругова хвиля може зупинити обертання (стати плоскою) або здійснювати обертання в напрямку, протилежному обертанням збуджувальної сили. Ці ефекти знайшли експериментальне підтвердження [7, 8].

Окрему увагу було приділено траєкторії руху резервуару під дією сили з круговим годографом. Дослідження показали, що при малій відносній кількості рідини траєкторія руху резервуару представляє собою переміщення в напрямку вісі Ox з обмеженими коливаннями в напрямку вісі Oy . Проте, при збільшенні відносної маси рідини траєкторія поступово змінюється на замкнену в околі початкового положення резервуару.

Всі ці дослідження були виконані для поступального руху резервуару з рідиною. В роботах [6, 9] було розроблено модель руху рідини в резервуарі, закріпленому на маятниковому підвісі, який виконує кутові рухи. Дослідження режимів руху вільної поверхні типу кругової хвилі для випадків похилих рухів резервуарів раніше не проводилися. Зазначимо, що для маятникового закріплення резервуару систематичне переміщення резервуару в одному з напрямків (як у випадку поступального руху) неможливе.

Тому метою цієї роботи є дослідження впливу рідинного наповнення на рух резервуару на маятниковому підвісі у випадку дії на систему моменту з круговим годографом.

2 Дослідження впливу рідини на рух системи резервуар-рідина

Розглянемо циліндричний резервуар з радіусом $R = 1$ м і висотою $H = 1.5$ м заповнений рідиною (водою) на глибину 1 м і підвішений на маятниковому підвісі довжиною l (Рис. 1).

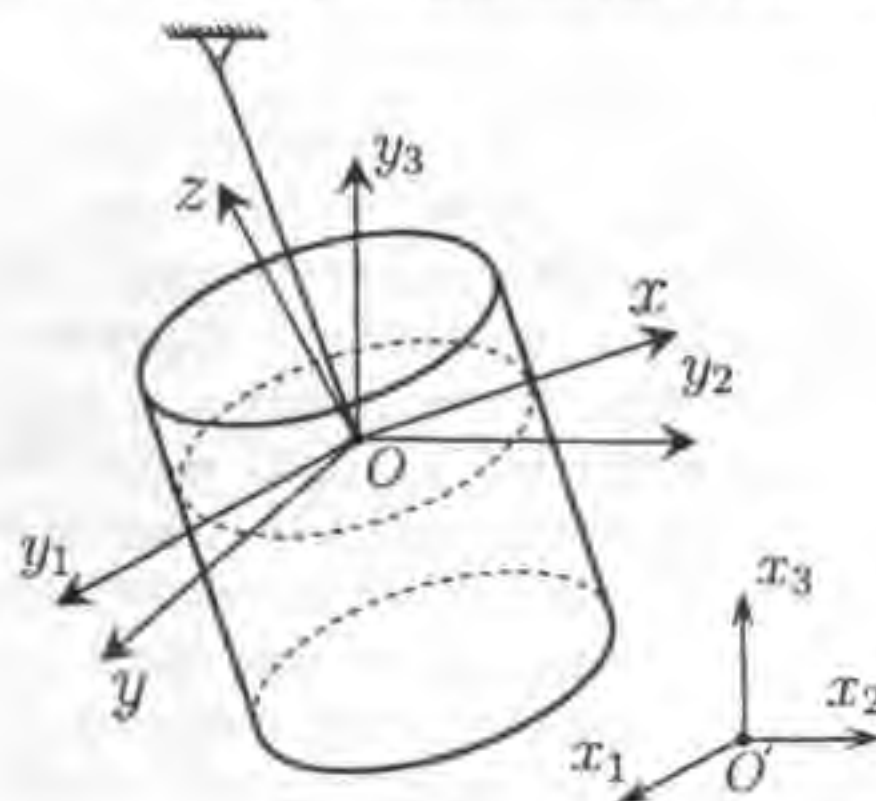


Рис. 1 Резервуар на маятниковому підвісі

В початковому стані система "резервуар-рідина" розглядалася в стані спокою. Рух системи збуджувався моментом з компонентами:

$$M_x = \frac{A}{J_r + J_l} \sin \omega t, M_y = \frac{A}{J_r + J_l} \cos \omega t, \\ M_z = 0$$

Дослідження виконувалося на основі нелінійної дискретної моделі, яка враховує 12 форм коливань і сумісний характер руху резервуару і рідини [6, 9]. Поведінка механічної системи тіло рідини описується сукупністю незалежних змінних $a_i, \alpha_i, \epsilon_i$, де a_i – амплітудні параметри збудження окремих форм коливань вільної поверхні рідини, α_i – кути повороту резервуару, ϵ_i – радіус вектор руху точки підвісу (в нашому випадку рух точки підвісу резервуару відсутній). При цьому амплітудні параметри руху рідини і параметри кутового руху резервуару і їхні швидкості вважалися величинами одного порядку малості.

Для дослідження впливу рідинного наповнення на рух системи розглядалося чотири варіанти співвідношення маси рідини M_l до маси резервуару M_r : 1 – $M_r = 0.25M_l$; 2 – $M_r = 2.5M_l$; 3 – $M_r = 25M_l$; 4 – $M_r = 250M_l$. Досліджено рух системи при $\omega = 2$ рад/с. В роботі [9] було досліджено специфіку розвинення поверхневого хвилеутворення типу кругової хвилі. Тепер зосередимо головну увагу на вивченні руху

резервуару, тому для оцінки характеру впливу рідинного наповнення було побудовано графіки траєкторій руху кінця підвісу в часі.

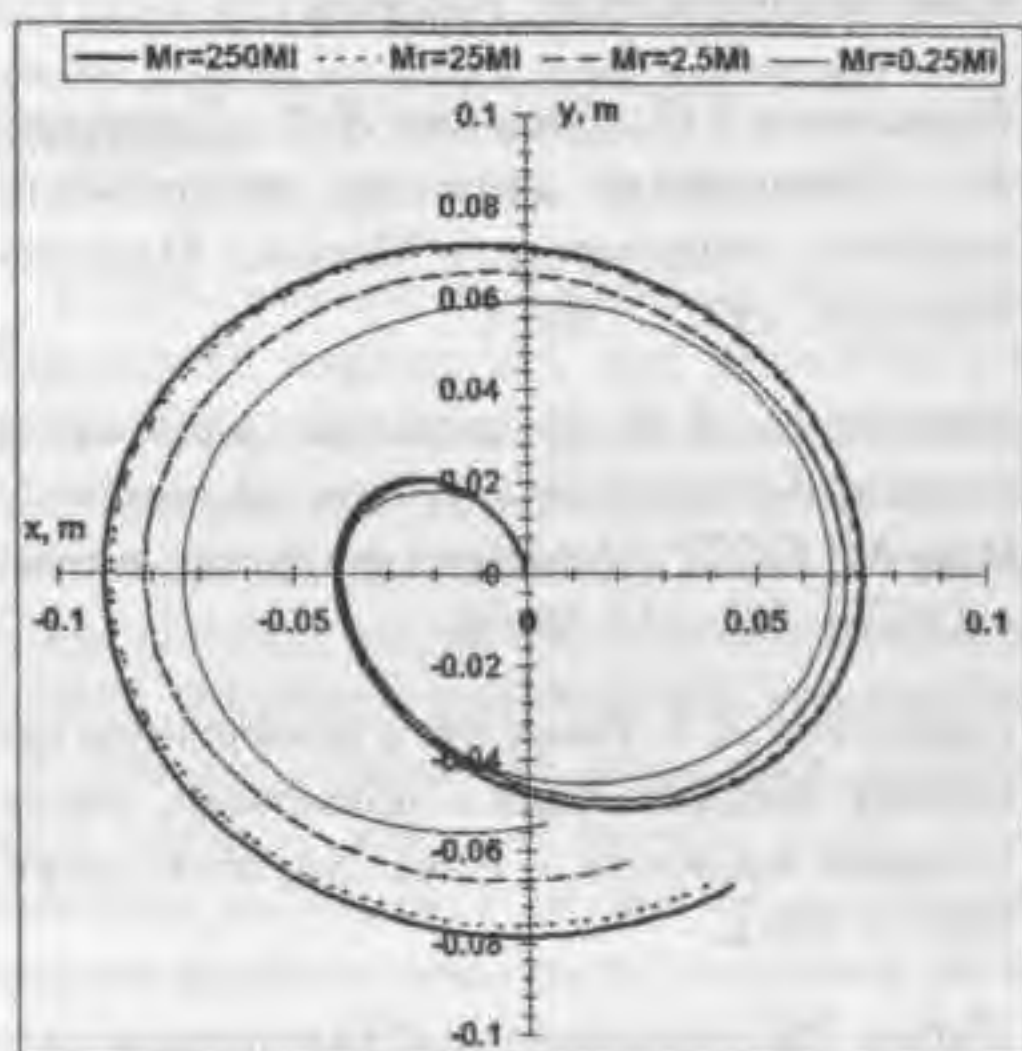


Рис. 2 Рух кінця підвісу при $l = 4.0$ м, $A = 70$ за $t = 6.6$ с

На Рис. 2 представлено траєкторію руху в часі резервуару при довжині підвісу $l = 4.0$ м, амплітудному параметру моменту $A = 70$ за час $t = 6.6$ с. На малюнку криві відповідають зазначеним вище чотирьом випадкам співвідношення маси рідини до маси резервуару. В цьому випадку спостерігаються приблизно однакові закони кутового руху резервуару. При цьому зростання відносної маси рідини сприяє зменшенню амплітуди коливання маятнікового підвісу, а вплив відносної маси рідини на фазу малопомітний. Слід зазначити, що для випадків $M_r = 25M_l$ і $M_r = 250M_l$ траєкторії практично збігаються по амплітуді і по фазі, що вказує, що для цих випадків практично вплив рідинного наповнення несуттєвий. Траєкторія руху резервуару відбувається в той же бік, що і зміна збуджувального моменту. Відмінність між траєкторіями зростає з часом.

Для порівняння на Рис. 3 представлено траєкторію руху в часі резервуару при коротшій довжині підвісу $l = 0.5$ м, амплітудному параметру моменту $A = 300$ за час $t = 4.65$ с. На малюнку криві обрані аналогічно Рис. 1. В цьому випадку відмінність між законами кутового руху резервуару є більш суттєвою. При цьому, як і раніше, зростання відносної маси рідини сприяє зменшенню амплітуди коливання маятнікового підвісу, а вплив відносної маси ріди-

ни на фазу малопомітний. Для випадків, коли співвідношення маси резервуару до маси рідини більше ніж $M_r = 25M_l$ траєкторії як і раніше практично збігаються по амплітуді і по фазі; траєкторія руху резервуару відбувається в той же бік, що і зміна збуджувального моменту. Відмінність між траєкторіями зростає з часом, проте вже на зазначеному інтервалі спостережень у випадку найбільшого відносного рідинного наповнення $M_r = 0.25M_l$ монотонний характер зміни траєкторій руху резервуару наближається до порушення.

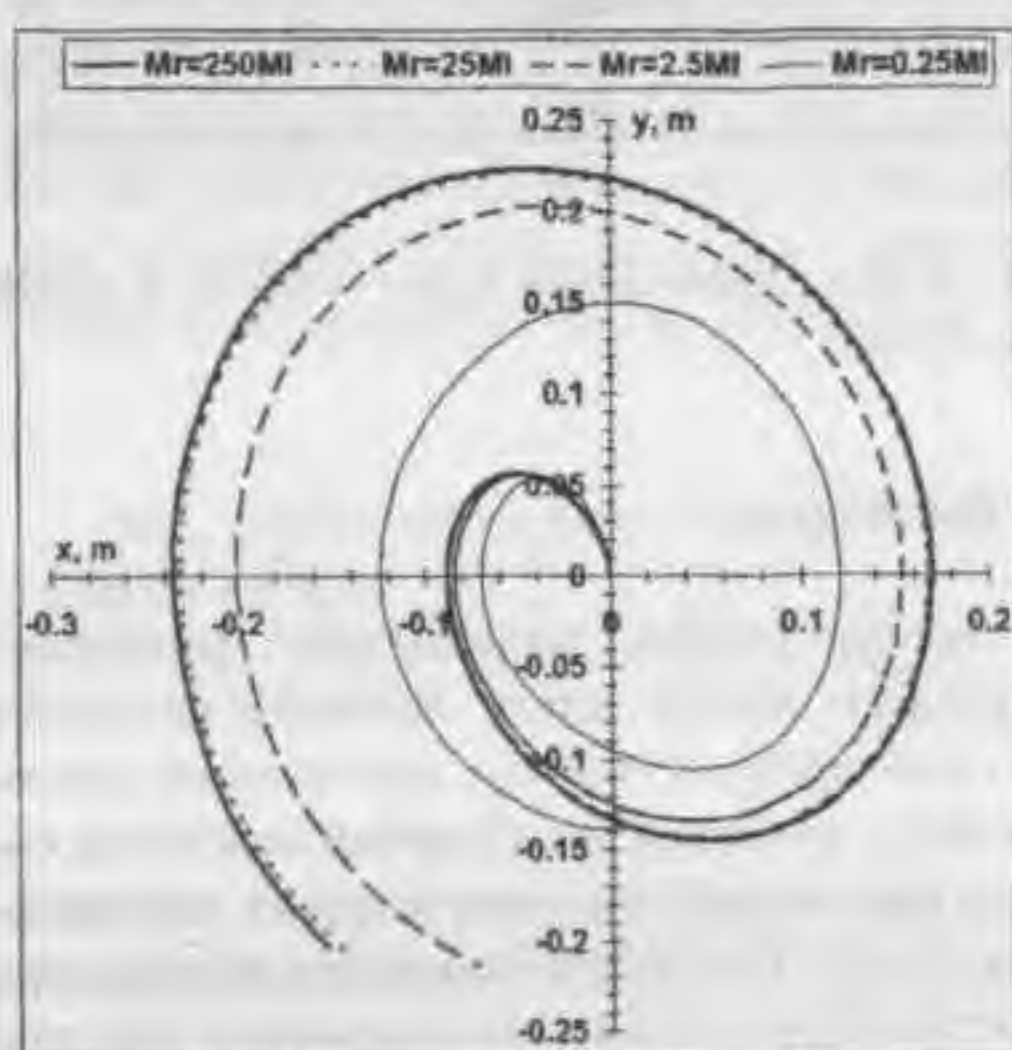


Рис. 3 Рух кінця підвісу при $l = 0.5$ м, $A = 300$ за $t = 4.65$ с

Для дослідження подальшої поведінки траєкторій руху системи на Рис. 4 було розглянуто поведінку такої ж системи, як і на Рис. 3, але на більшому проміжку часу - $t = 7.8$ с. В цьому випадку траєкторії роблять більшу кількість обертів. Для випадків $M_r = 25M_l$ і $M_r = 250M_l$, як і раніше, спостерігається монотонний характер і незначна розбіжність між значеннями амплітуд, що вказує на те, що після значень $M_r = 25M_l$ впливом рідинного наповнення на рух резервуару можна нехтувати. У випадках $M_r = 0.25M_l$ і $M_r = 2.5M_l$ зміни траєкторій втрачають монотонний характер, що особливо помітне для $M_r = 0.25M_l$, коли спостерігається декілька самоперетинів траєкторії і її повернення практично в окіл початкового положення резервуару. Відмінність по фазі і амплітуді стає суттєвою.

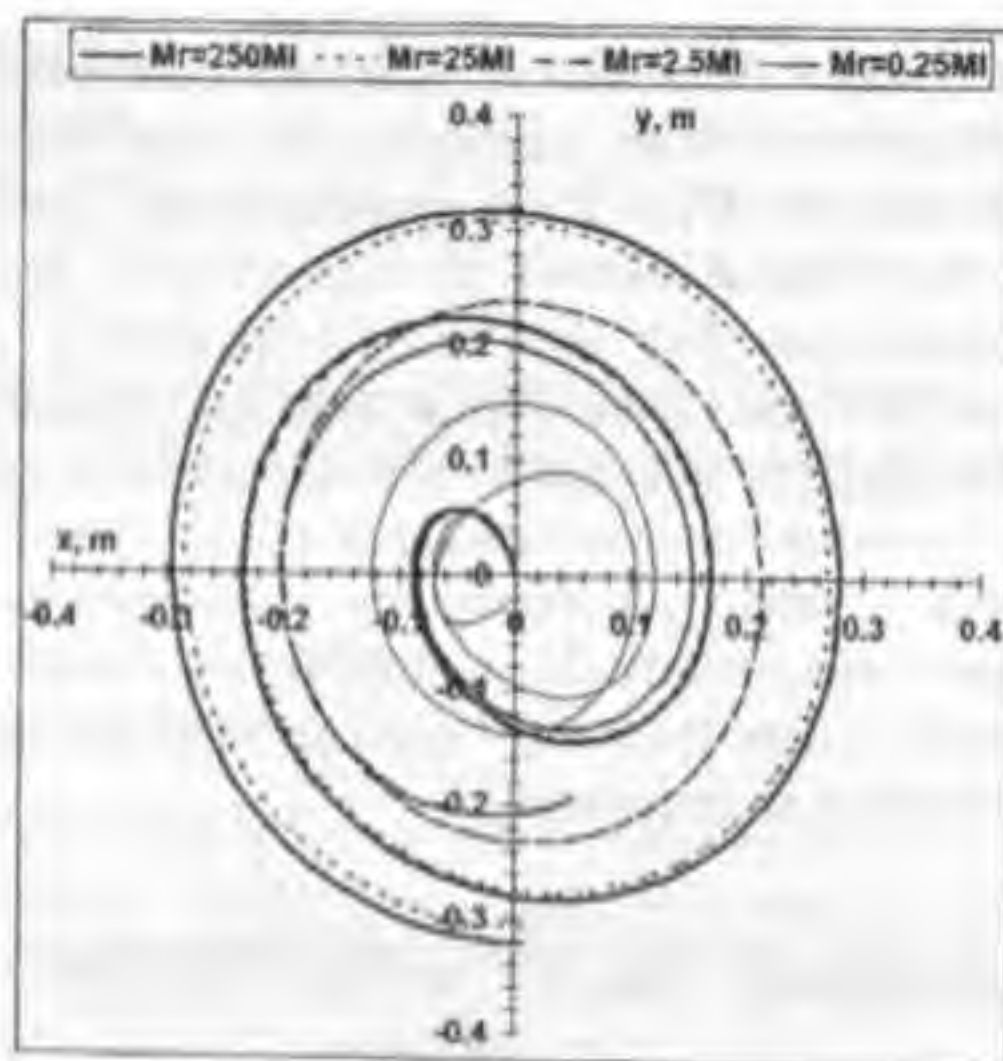


Рис. 4 Рух кінця підвісу при $l = 0.5$ м, $A = 300$ за $t = 7.8$ с

3 Висновки

На основі раніше розробленого аналітико-чисельного методу опису динаміки сумісного руху резервуару з рідиною, яка частково заповнює його, виконані дослідження поведінки системи при закріпленні резервуару на маятниковому підвісі. Розглянуто поведінку системи при збудженні її руху моментом з круговим годографом. Встановлено, що при незначній відносній масі рідини траєкторія руху резервуару незначно відрізняється від випадку руху системи, коли рідина "затверділа". При цьому траєкторія порушує оберти з часом і віддаляється від початкового положення.

У випадку значної відносної маси рідини картина якісно змінюється. Тепер рідинне наповнення сприяє зменшенню амплітуд відхилень траєкторії резервуару від початкового рівноважного положення, монотонне зростання з часом відхилень резервуару від початкового положення порушується і виникає така узгодженість внутрішнього руху рідини і зовнішнього навантаження, що вони частково зрівноважуються. Траєкторія може самоперетинатися.

Аналогічні явища спостерігаються і у випадку поступального руху резервуару з рідиною. Проте у випадку резервуару на маятниковому підвісі систематичний ухил від початкового положення, який спостерігається для малих

відносних мас рідини, унеможливорюється маятниковим типом закріплення резервуару.

Список використаних джерел

1. Нариманов Г.С., Докучаев Л.В., Луковский И.А. Нелинейная динамика летательного аппарата с жидкостью. – Москва: Машиностроение, 1977. – 208 с.
2. Столбецов В.И. О немалых колебаниях жидкости в прямом круговом цилиндре // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. – 1967. – №2. – С. 59–66.
3. Луковский И.А. Введение в нелинейную динамику твердого тела с полостями, содержащими жидкость. – Киев: Наукова думка, 1990. – 295 с.
4. Либин Э.Е., Якутова Н.Г. О круговой волне в цилиндрическом сосуде // Колебания упругих конструкций с жидкостью. – Новосибирск: НЭТИ, 1974. – С. 137–141.
5. Бояршина Л.Г., Ковальчук П.С. О волновых формах свободной поверхности жидкости, содержащейся в цилиндрическом сосуде // Прикл. механика. – 1986. – 22. – №3. – С. 113–116.
6. Лимарченко О.С., Матараццо Дж., Ясинский В.В. Динамика вращающихся конструкций с жидкостью. – Киев: "Гнозис", 2002. – 304 с.
7. Коваленко А.П., Лимарченко О.С. Экспериментальные исследования поведения жидкости при импульсном возбуждении // Прикл. механика. – 1979. – 15. – №1. – С. 95–97.
8. Микишев Г.Н., Рабинович Б.И. Динамика твердого тела с полостями, частично заполненными жидкостью. М.: Машиностроение, 1968. – 532 с.
9. Ковальчук Б.П., Лимарченко О.С. Импульсное моментное возбуждение руху резервуару з рідиною при похилому русі системи – Вісник Київського університету, серія Фізико-математичні науки, в. №2, 2009. С. 59–62

Надійшла до редколегії 29.04.2010

УДК 532.5

Олександр Б. Курилко, аспірант

Локальна структура двовимірної течії
Стокса поблизу кута прямокутної
порожнини

Досліджена течія Стокса в двовимірній прямокутній порожнині, яка приводиться в рух однією зі стінок, що рухається по заданому закону. Метод суперпозиції виявляється ефективним для розв'язання задач механіки, що стосуються повільної течії в'язкої рідини під дією дотичних швидкостей, прикладених на її стінках. Показано існування кутового вихору поблизу кутової точки, коли задана швидкість на верхній стінці не є нульовою. Показані графічно лінії течії частинок рідини для заданого розподілу швидкостей.

Ключові слова: прямокутна порожнина, течія Стокса, вихори Моффата.

Olexandr B. Kurylko, PhD student

The local structure of two-dimensional
Stokes flow near the corner of rectangular
cavity

Stokes flow in a rectangular two-dimensional cavity in which the flow is driven by the steady motion of one of the walls is studied. This method appears effective for solving mechanical problems concerning creeping flow of viscous fluid set up in rectangular cavity by tangential velocities applied along its walls. The existence of a corner eddy near the corner point when the velocity on the top wall is not equal to zero is demonstrated. The streamline patterns for some typical distribution of velocities are shown graphically.

Key words: rectangular cavity, Stokes flow, Moffat's eddies.

E-mail: alexandr.kurylko@gmail.com

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н., професор Мелешко В.В.

1 Вступ

Задачі прикладної гідромеханіки, які пов'язані зі стоксовими течіями в'язкої рідини у двовимірній прямокутній області під дією дотичних швидкостей є предметом інтенсивного дослідження на протязі останніх десятиліть. Відомо, що такі задачі зводяться до однорідного бігармонічного рівняння відносно скалярної функції течії при відомих значеннях цієї функції та її похідної на границях. Локальна поведінка течії Стокса поблизу кутових точок викликає великий інтерес серед дослідників [1, 2, 4, 8].

В роботах Моффата [6, 7] показано, що течія в околі кутової точки складається із послідовності вихорів, які характеризуються різким зменшенням їх інтенсивності та величини. Існування вихорів Моффата в околі кута прямокутної порожнини для випадку, коли швидкість на частині границі, прилеглої до кутової точки, стає нульовою є відомим результатом [2, 3, 4].

Мета даної роботи полягає у дослідженні поведінки двовимірної течії Стокса поблизу кута прямокутної порожнини, коли швидкість на границі в околі кутової точки не є нульовою.

2 Постановка задачі

Розглянемо двовимірну повільну течію нестисливої в'язкої рідини в прямокутній порожнині $|x| \leq a$, $|y| \leq b$, яка викликається заданими дотичними швидкостями $U_{top}(x)$ та $U_{bot}(x)$ на верхній ($y = b$) та нижній ($y = -b$) стінках відповідно (Рис.1). Вважаємо, що задані швидкості є парними функціями по x .

Для нестисливої двовимірної течії компоненти вектора швидкості $u(x, y)$ та $v(x, y)$ визначаються як

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (1)$$

Якщо рух течії є настільки повільним, що інерційними силами можна знехтувати, порів-

няно із в'язкими членами, то функція течії ψ задовільняє бігармонічне рівняння

$$\Delta\Delta\psi = 0, \quad (2)$$

з граничними умовами

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial\psi}{\partial x} = 0, \quad x = \pm a, \quad |y| \leq b, \quad (3)$$

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial\psi}{\partial y} = U_{top}(x), \quad y = b, \quad |x| \leq a, \quad (4)$$

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial\psi}{\partial y} = U_{bot}(x), \quad y = -b, \quad |x| \leq a. \quad (5)$$

Отже, задача для течії Стокса зводиться до відшукування бігармонічної функції ψ , коли задані значення самої функції та її нормальної похідної у всіх точках замкнутої границі.

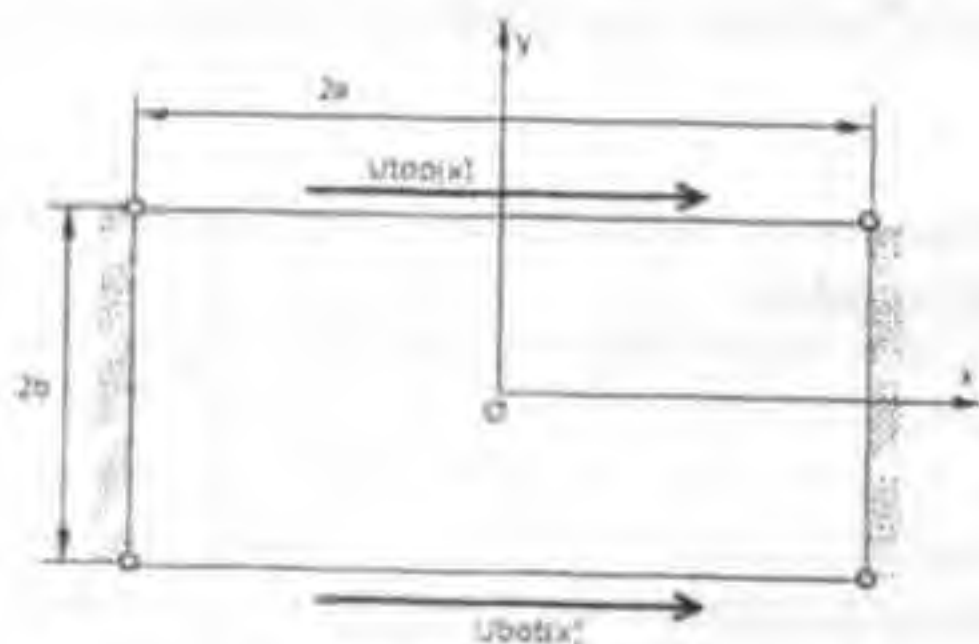


Рис. 1. Геометрія задачі.

Завдяки лінійності граничної задачі (2)–(5) її розв'язок можна подати у вигляді

$$\psi(x, y) = \psi_1(x, y) + \psi_2(x, y) \quad (6)$$

де бігармонічна функція $\psi_1(x, y)$ є парною по x та y , а функція $\psi_2(x, y)$ – парною по x та непарною по y .

Функції $\psi_1(x, y)$ та $\psi_2(x, y)$ є розв'язками наступних граничних задач

$$\Delta\Delta\psi_1 = 0, \quad (7)$$

$$\psi_1 = 0, \quad \frac{\partial\psi_1}{\partial x} = 0, \quad x = \pm a, \quad |y| \leq b, \quad (8)$$

$$\psi_1 = 0, \quad \frac{\partial\psi_1}{\partial y} = \pm U_1(x), \quad y = \pm b, \quad |x| \leq a, \quad (9)$$

та

$$\Delta\Delta\psi_2 = 0, \quad (10)$$

$$\psi_2 = 0, \quad \frac{\partial\psi_2}{\partial x} = 0, \quad x = \pm a, \quad |y| \leq b, \quad (11)$$

$$\psi_2 = 0, \quad \frac{\partial\psi_2}{\partial y} = U_2(x), \quad y = \pm b, \quad |x| \leq a, \quad (12)$$

де

$$U_1(x) = \frac{1}{2}(U_{top}(x) - U_{bot}(x)),$$

$$U_2(x) = \frac{1}{2}(U_{top}(x) + U_{bot}(x)). \quad (13)$$

3 Побудова аналітичного розв'язку

Граничні задачі (7)–(9) та (10)–(12) розв'язуємо аналітичним методом суперпозиції, який є ефективним для багатьох двовимірних бігармонічних задач в теорії пружності, згину пластин і течії Стокса [3, 4, 5]. У цих роботах можна знайти подробиці методу, нижче подаємо лише зведені результати.

Бігармонічна функція течії $\psi_1(x, y)$ має вигляд

$$\psi_1(x, y) = b \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} X_m^{(1)} p_m^{(1)}(y) \cos \alpha_m x -$$

$$- a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\beta_l} Y_l^{(1)} q_l^{(1)}(x) \cos \beta_l y, \quad (14)$$

де позначено $\alpha_m = \frac{(2m-1)\pi}{2a}$, $\beta_l = \frac{(2l-1)\pi}{2b}$, а функції $p_m^{(1)}(y)$ та $q_l^{(1)}(x)$ задаються наступними виразами

$$p_m^{(1)}(y) = b \tanh \alpha_m b \frac{\cosh \alpha_m y}{\cosh \alpha_m b} - y \frac{\sinh \alpha_m y}{\cosh \alpha_m b},$$

$$q_l^{(1)}(x) = a \tanh \beta_l a \frac{\cosh \beta_l x}{\cosh \beta_l a} - x \frac{\sinh \beta_l x}{\cosh \beta_l a}.$$

Невідомі коефіцієнти $X_m^{(1)}$ та $Y_l^{(1)}$ рядів Фур'є визначаються із нескінченної системи алгебраїчних рівнянь

$$X_m^{(1)} b \Delta_1(\alpha_m b) - \sum_{l=1}^{\infty} Y_l^{(1)} \frac{4\beta_l^2 \alpha_m^2}{(\alpha_m^2 + \beta_l^2)^2} =$$

$$= (-1)^{m-1} \alpha_m U_m^{(1)},$$

$$Y_l^{(1)} a \Delta_1(\beta_l a) - \sum_{m=1}^{\infty} X_m^{(1)} \frac{4\beta_l^2 \alpha_m^2}{(\alpha_m^2 + \beta_l^2)^2} = 0, \quad (15)$$

де $\Delta_1(\xi) = \tanh \xi + \frac{\xi}{\cosh^2 \xi}$,

а $U_m^{(1)}$ – коефіцієнти Фур'є парної функції $U_1(x)$

$$U_m^{(1)} = \frac{1}{a} \int_{-a}^a U_1(x) \cos \alpha_m x dx. \quad (16)$$

Асимптотика коефіцієнтів $X_m^{(1)}$ та $Y_l^{(1)}$ на нескінченності має вигляд [5]

$$\begin{aligned} X_m^{(1)} &= \frac{2\pi^2 U_1(a)}{ab(\pi^2 - 4)} - \frac{\pi U_1'(a)}{2ab\alpha_m} + x_m^{(1)}, \\ x_m^{(1)} &= \operatorname{Re} \left(E_\lambda^{(1)} \alpha_m^{-\lambda} \right) + o(m^{-3}), \quad m \rightarrow \infty, \\ Y_l^{(1)} &= \frac{4\pi U_1(a)}{ab(\pi^2 - 4)} - \frac{\pi U_1'(a)}{2ab\beta_l} + y_l^{(1)}, \\ y_l^{(1)} &= -\operatorname{Re} \left(E_\lambda^{(1)} \beta_l^{-\lambda} \right) + o(l^{-3}), \quad l \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (17)$$

з деякою комплексною сталою $E_\lambda^{(1)}$ та $\lambda = 2.73959 + i1.11902$.

Бігармонічна функція течії $\psi_2(x, y)$ має вигляд

$$\begin{aligned} \psi_2(x, y) &= b \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} X_m^{(2)} p_m^{(2)}(y) \cos \alpha_m x - \\ &- a \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\delta_k} Y_k^{(2)} q_k^{(2)}(x) \sin \delta_k y, \end{aligned} \quad (18)$$

де $\alpha_m = \frac{(2m-1)\pi}{2a}$, $\delta_k = \frac{k\pi}{b}$, а функції $p_m^{(2)}(y)$ та $q_k^{(2)}(x)$ мають наступний вигляд

$$p_m^{(2)}(y) = b \coth \alpha_m b \frac{\sinh \alpha_m y}{\sinh \alpha_m b} - y \frac{\cosh \alpha_m y}{\sinh \alpha_m b},$$

$$q_k^{(2)}(x) = a \tanh \delta_k a \frac{\cosh \delta_k x}{\cosh \delta_k a} - x \frac{\sinh \delta_k x}{\cosh \delta_k a}.$$

Коефіцієнти $X_m^{(2)}$ та $Y_k^{(2)}$ визначаються із нескінченної системи алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} X_m^{(2)} b \Delta_2(\alpha_m b) - \sum_{k=1}^{\infty} Y_k^{(2)} \frac{4\alpha_m^2 \delta_k}{(\delta_k^2 + \alpha_m^2)^2} &= \\ &= (-1)^{m-1} \alpha_m U_m^{(2)}, \\ Y_k^{(2)} a \Delta_1(\delta_k a) - \sum_{m=1}^{\infty} X_m^{(2)} \frac{4\alpha_m \delta_k^2}{((\delta_k^2 + \alpha_m^2)^2)} &= 0, \end{aligned} \quad (19)$$

у якій позначено $\Delta_2(\xi) = \coth \xi - \frac{\xi}{\sinh^2 \xi}$,

а $U_m^{(2)}$ – коефіцієнти Фур'є парної функції $U_2(x)$

$$U_m^{(2)} = \frac{1}{a} \int_{-a}^a U_2(x) \cos \alpha_m x dx. \quad (20)$$

Асимптотика коефіцієнтів $X_m^{(2)}$ та $Y_k^{(2)}$ на нескінченності обчислюється аналогічно, згідно формул (17).

Для достатньо гладкої функції $U(x)$ локальне представлення функції течії ψ в околі кутової точки (a, b) має вигляд

$$\begin{aligned} \psi(\rho, \theta) &= \frac{4U(a)}{\pi^2 - 4} \rho \left[\theta \cos \theta - \frac{\pi}{2} \left(\frac{\pi}{2} - \theta \right) \sin \theta \right] + \\ &+ \frac{U'(a)}{4} \rho^2 \left(2\theta - \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \cos 2\theta + \sin 2\theta \right) - \\ &- \frac{U''(a)}{8} \rho^3 (\sin \theta + \sin 3\theta) + \\ &+ \operatorname{Re} \{ A_M \rho^{\delta_1+1} [\sin \theta \sin \delta_1 \left(\frac{\pi}{2} - \theta \right) + \\ &+ \cos \theta \sin \delta_1 \theta] \} + O(\rho^4), \end{aligned} \quad (21)$$

де полярні координати (ρ, θ) введені згідно $x = a - \rho \cos \theta$, $y = b - \rho \sin \theta$. Член, пропорційний ρ^{δ_1+1} відповідає власному розв'язку для нескінченного квадранта. Моффат [6] встановив, що він містить нескінченну кількість вихорів біля вершини.

4 Чисельні результати

Розглянемо приклад течії у квадратній порожнині з $a = 1$ та $b = 1$. Швидкість на верхній та нижній стінках задається наступним чином

$$U_{top}(x) = \cos^3 \frac{\pi x}{2a}, \quad U_{bot}(x) = 0.$$

В роботах [4, 5] детально викладено методику організації розрахунків, що базується на переході до розв'язування скінченних систем для невідомих $X_m^{(1)}$, $Y_l^{(1)}$, $X_m^{(2)}$ та $Y_k^{(2)}$ із урахуванням їх асимптотичної поведінки на нескінченності. У всіх скінченних системах залишали по 15 невідомих $X_m^{(1)}$, $Y_l^{(1)}$, $X_m^{(2)}$ та $Y_k^{(2)}$. Похибка виконання граничних умов для швидкостей на стінках не перевищувала 0.1%.

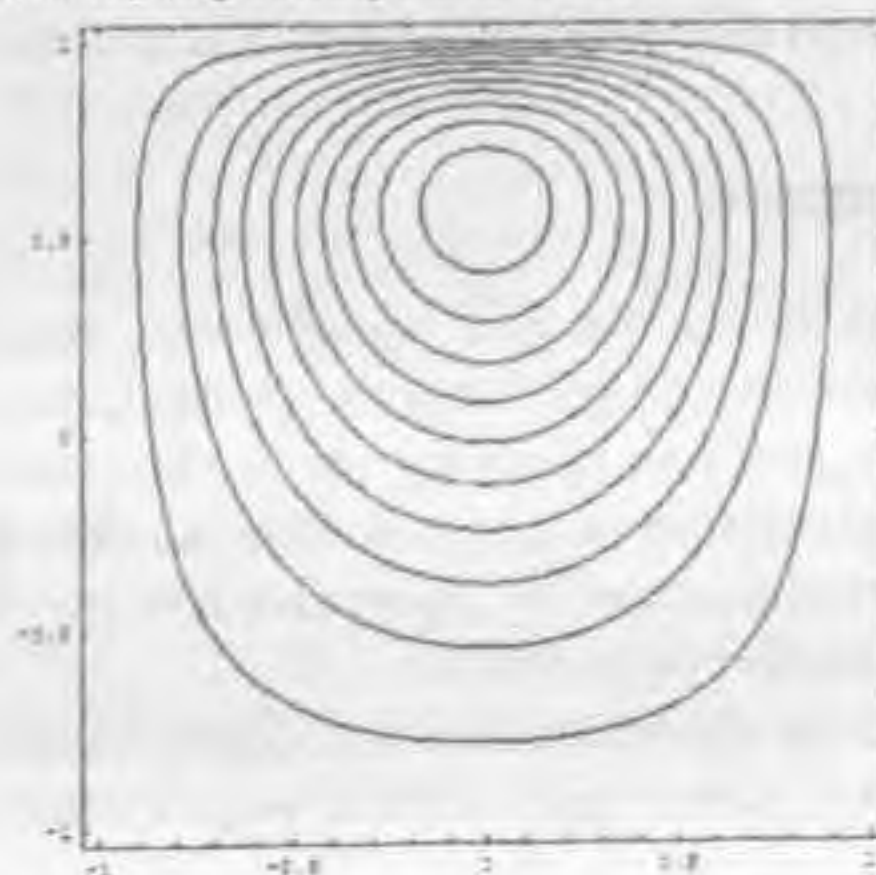


Рис. 2. Загальна картина ліній течії в квадратній порожнині.

На рис.2 показана загальна картина ліній течії, які відповідають постійним значенням функції $\psi(x, y)$ з інтервалом 0.015.

Рис.3 ілюструє картину ліній течії в околі верхньої правої кутової точки квадратної порожнини. Цікавою є наявність сепаратиси $\psi(x, y) = 0$, яка поділяє комірку на так звані конвективні зони, в яких існує лише один вихор. $\theta = 89^\circ$ - це кут, який утворює ця сепаратриса із верхньою стінкою, що обчислюється за наступною формулою

$$\tan \theta = -2 \frac{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \big|_{(x_s, b)}}{\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \big|_{(x_s, b)}}, \quad (22)$$

де $x_s = 0.977$ - це абсциса точки, в яку входить сепаратриса.

Особливо цікавою є наявність вихору поблизу кутової точки, центр якого знаходиться в точці з координатами (0.989, 0.984).

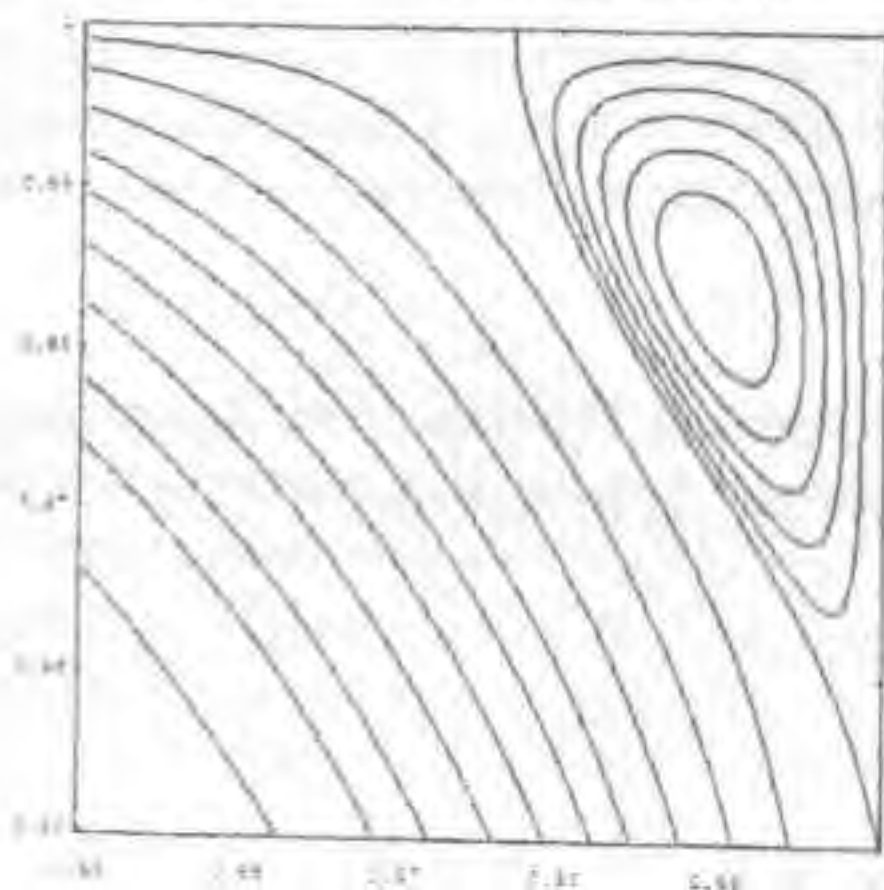


Рис. 3. Картина ліній течії поблизу верхньої правої кутової точки квадратної порожнини.

5 Висновки

1. Метод суперпозиції є ефективним аналітичним засобом для розв'язання двовимірної граничної задачі для прямокутника. Незважаючи на громіздку математичну роботу, кінцеві формули виявилися досить простими для проведення чисельних обчислень.
2. Показана наявність вихорів Моффата поблизу кутової точки прямокутної порожнини для

випадку, коли задана швидкість на границі в околі кутової точки не є нульовою.

3. Топологія ліній течії в околі кута квадратної порожнини для задачі, розглянутої в даній роботі, має подібну структуру, яка втисновлена в роботах [3, 4] для випадку, коли швидкість на частині границі, прилеглої до кутової точки, є нульовою.

4. Знання поля швидкості у прямокутній порожнині дозволяє вивчити задачу про змішування в'язкої рідини при її повільних Стоксових рухах.

Список використаних джерел

1. Hancock C. The angle of separation in Stokes flow near a sharp corner // Journal of Mechanics and Applied Mathematics. - 1984. - 37. - p. 113-119.
2. Krasnopolskaya T.S. Two-dimensional Stokes flow near a corner in a right angle wedge and Moffat's eddies // Mech. Russ. Comm. - 1995. - 22. - p. 9-14.
3. Meleshko V.V. Biharmonic problem in a rectangle // Appl. Sci. Res. - 1998. - 58. - p. 217-249.
4. Meleshko V.V. Steady Stokes flow in a rectangular cavity // Proc. R. Soc. London. - 1996. - A452. - p. 1999-2002.
5. Meleshko V.V., Gomiiko A. M. Infinite systems for a biharmonic problem in a rectangle // Proc. R. Soc. London. - 1997. - A453. - p. 2139-2160.
6. Moffat H.K. Viscous and resistive eddies near a sharp corner // J. Fluid Mech. - 1964a. - 18. - p. 1-18.
7. Moffat H.K. Viscous eddies near a sharp corner // Arch. Mech. Stosow. - 1964b. - 2. - p. 365-372.
8. Shankar P.N. The eddy structure in Stokes flow in a cavity // J. Fluid Mech. - 1993. - 250. - p. 371-383.

Надійшла до редколегії 18.10.2010

УДК 517.956.4

В. М. Лучко*, к.ф.-м.н., асистент

**Задача Коші для параболічного
псевдодиференціального рівняння
вищого порядку з імпульсним впливом**
Серія: фізико-математичні науки

Розглянуто задачу Коші для параболічного псевдодиференціального рівняння вищого порядку по t з імпульсним впливом. Для такої задачі побудовано матрицант, за допомогою якого як обернене перетворення Фур'є визначається фундаментальна система розв'язків.

Ключові слова: задача Коші, псевдодиференціальне рівняння параболічного типу, імпульсна дія, матрицант.

*E-mail: vmluchko@gmail.com

Статтю представив член-кор. НАНУ, д.ф.-м.н. М.О. Перестюк

Теорія псевдодиференціальних операторів (ПДО) та псевдодиференціальних рівнянь (ПДР), яка в сучасній формі була створена в середині шістдесятих років, є предметом багатьох досліджень. Їх число значно збільшилося після того, як виявилось, що ПДО тісно пов'язані з важкими і важливими задачами аналізу та сучасної математичної фізики. Лінійні параболічні псевдодиференціальні рівняння (ППДР) з негладкими символами були визначені С.Д. Ейдельманом і Я.М. Дріном на початку сімдесятих років у працях [1]–[4]. Символи таких ПДО є негладкими в точці $\sigma = 0$, $\sigma \in \mathbb{R}^n$. Дослідження таких рівнянь зі сталим (незалежним від просторових координат $x \in \mathbb{R}^n$ і часової координати $t \in (0, T]$) однорідним символом було розпочате в [4]. Фундаментальний розв'язок задачі Коші для рівняння з таким символом був знайдений за допомогою перетворення Фур'є. М.В. Федорюком [5] знайдена точна асимптотика фундаментального розв'язку задачі Коші при $x \rightarrow \infty$, яка не є експоненціальною, як для диференціальних рівнянь [6], а степеневою. В [2] Я.М. Дрінь отримав шаудерівські оцінки і встановив коректну розв'язність задачі Коші в класах гельдерових функцій. В монографії А.М. Самойленка та М.О. Перестюка [7] досліджуються основні питання теорії звичайних диференціальних рівнянь з імпульсною дією.

V. M. Luchko*, Cand.Sci (Phys.-Math.),
Assistant Professor

**The Cauchy problem for parabolic
pseudodifferential equation of higher
order with impulse action**
Series: Physics & Mathematics Sciences

Considered the Cauchy problem of parabolic pseudodifferential equation of higher order according to t with impulse action. For this problem it is constructed matricant, by which as reverse transformation of Fourier is determined fundamental system of solution.

Key words: The Cauchy problem, pseudodifferential equation of parabolic type, impulse action, matricant.

У шарі $\Pi_T = \{(t, x), t \in (0, T], x \in \mathbb{R}^n\}$ розглянемо задачу Коші для параболічного псевдодиференціального рівняння довільного порядку

$$\frac{\partial^m u(t, x)}{\partial t^m} = Au(t, x), t \neq \tau_l, \quad (1)$$

з початковими умовами

$$\left. \frac{\partial^{j-1} u(t, x)}{\partial t^{j-1}} \right|_{t=0} = \varphi_j(x), j = \overline{1, m}, \quad (2)$$

та імпульсними умовами

$$\begin{aligned} u_t^{(j-1)}(\tau_l + 0, x) - u_t^{(j-1)}(\tau_l - 0, x) = \\ = B_l^{(j-1)} u_t^{(j-1)}(\tau_l - 0, x) \end{aligned} \quad (3)$$

де $Au(t, x)$ визначається так

$$Au(t, x) = F_{\sigma \rightarrow x}^{-1} \left(\sum_{k_0 \gamma + \nu = m \gamma} P_{\nu k_0}(\sigma) \frac{d^{k_0} V}{dt^{k_0}} \right),$$

$$V = F_{x \rightarrow \sigma} u(t, x),$$

$$u_t^{(j-1)}(\tau_l \pm 0, x) = \lim_{t \rightarrow \tau_l \pm 0} u_t^{(j-1)}(t, x),$$

$\sigma \in \mathbb{R}^n$, $\gamma \geq 1$, $k_0 < m$, $B_l^{(j)}$, $l = \overline{1, p}$ – сталі, функції $\{\varphi_j(x)\}_{j=1}^m$ та $f(t, x)$ відомі, які априорі допускають перетворення Фур'є, $0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_l < \dots < \tau_p < T$, $\sigma \in \mathbb{R}^n$, $F_{x \rightarrow \sigma}$, $F_{\sigma \rightarrow x}^{-1}$ – відповідно пряме та обернене перетворення Фур'є, p – скінченне.

Розв'язок задачі (1)–(3) будемо шукати у вигляді

$$u(t, x) = F_{\sigma \rightarrow x}^{-1} [V(t, \sigma)] \quad (4)$$

де $V(t, \sigma)$ є розв'язком задачі Коші з імпульсною дією для звичайного диференціального рівняння, в якому σ на правах параметра

$$\frac{d^m V(t, \sigma)}{dt^m} = \sum_{k_0 \gamma + \nu = m \gamma} P_{\nu k_0}(\sigma) \frac{d^{k_0} V(t, \sigma)}{dt^{k_0}}, \quad (5)$$

$t \neq \tau_i$, умовам (2), (3) відповідають такі умови

$$\left. \frac{dV^{(j-1)}(t, \sigma)}{dt^{j-1}} \right|_{t=0} = \tilde{\varphi}_j(\sigma), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} V_t^{(j-1)}(\tau_i + 0, \sigma) - V_t^{(j-1)}(\tau_i - 0, \sigma) = \\ = B_i^{(j-1)} V_t^{(j-1)}(\tau_i - 0, \sigma). \end{aligned} \quad (7)$$

Означення. Рівняння (1) будемо називати параболічним, якщо корені характеристичного рівняння

$$\lambda^m - \sum_{k_0 \gamma + \nu = m \gamma} P_{\nu k_0}(\sigma) \lambda^{k_0} = 0 \quad (8)$$

задовольняють нерівність

$$\operatorname{Re} \lambda_i(\sigma) \leq -a_0 |\sigma|^\gamma, \quad (9)$$

$a_0 > 0$, $\sigma \in \mathbb{R}^n$, $i = \overline{1, m}$.

Теорема 1. Нехай коефіцієнти рівняння $P_{\nu k_0}(\sigma)$ мають N неперервних похідних по σ при $\sigma \neq 0$, тобто $P_{\nu k_0}(\sigma) \in C^N$, причому

$$\left| D_\sigma^l P_{\nu k_0}(\sigma) \right| \leq c_N |\sigma|^{\nu - |l|},$$

$|l| \leq N$, $k_0 \gamma + \nu = m \gamma$, $\sigma \in \mathbb{R}^n$, крім того $P_{\nu k_0}(\sigma)$ – однорідні функції степеня ν , тоді корені характеристичного рівняння (8) є однорідними функціями аргументу σ степеня γ і для їх похідних правильна нерівність

$$\left| D_\sigma^l \lambda_j(\sigma) \right| \leq c_N |\sigma|^{\gamma - |l|}, \quad j = \overline{1, m}. \quad (10)$$

Нехай $K(t, \tau_i, \sigma) = \{K_1(t, \tau_i, \sigma), \dots, K_m(t, \tau_i, \sigma)\}$, $\tau_i < t < \tau_{i+1}$ – нормальна фундаментальна система розв'язків задачі Коші

$$\frac{d^m K_s(t, \tau_i, \sigma)}{dt^m} = \sum_{k_0 \gamma + \nu = m \gamma} P_{\nu k_0}(\sigma) \frac{d^{k_0} K_s(t, \tau_i, \sigma)}{dt^{k_0}},$$

$$D_t^{j-1} K_s(t, \tau_i, \sigma) \Big|_{t=\tau_i+0} = \delta_{s-1, j-1},$$

де $\delta_{s,j}$ – символ Кронекера, $s = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, m}$. Компоненти такої фундаментальної системи побудовані у праці [8].

Побудуємо матрицант даної задачі, за допомогою якого буде визначатися розв'язок задачі (5)–(7) на кожному з проміжків $\tau_i < t < \tau_{i+1}$. Спочатку розглянемо проміжок (τ_0, τ_1) , на якому розв'язок рівняння (5) визначається формулою

$$V(t, \sigma) = K(t, \tau_0, \sigma) \cdot c,$$

де c – вектор-стовпчик, а за умов (6) розв'язок подається у вигляді

$$V(t, \sigma) = K(t, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}(\sigma),$$

де введено таке позначення $\tilde{\varphi}(\sigma) = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_1(\sigma) \\ \dots \\ \tilde{\varphi}_m(\sigma) \end{pmatrix}$.

На проміжку $t \in (\tau_1, \tau_2)$ розв'язок рівняння (5) має вигляд

$$V(t, \sigma) = K(t, \tau_1, \sigma) \cdot c. \quad (11)$$

Задовольнимо умови (7)

$$\begin{cases} c_1 = (1 + B_1^{(0)}) K_1(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_1(\sigma) + \dots \\ \quad + (1 + B_1^{(0)}) K_m(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_m(\sigma), \\ c_2 = (1 + B_1^{(1)}) K'_1(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_1(\sigma) + \dots \\ \quad + (1 + B_1^{(1)}) K'_m(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_m(\sigma), \\ \dots \\ c_m = (1 + B_1^{(m-1)}) K_1^{(m-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_1(\sigma) + \\ \quad + \dots + (1 + B_1^{(m-1)}) K_m^{(m-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_m(\sigma), \end{cases}$$

Підставляючи знайдені величини $c_1, \dots, c_m$ в (11), отримаємо

$$\begin{aligned} V(t, \sigma) = K_1(t, \tau_1, \sigma) \left[\left(1 + B_1^{(0)}\right) K_1(\tau_1, \tau_0, \sigma) \times \right. \\ \times \tilde{\varphi}_1(\sigma) + \dots + \left(1 + B_1^{(0)}\right) K_m(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_m(\sigma) \Big] + \\ + K_2(t, \tau_1, \sigma) \left[\left(1 + B_1^{(1)}\right) K'_1(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_1(\sigma) + \right. \\ \left. + \dots + \left(1 + B_1^{(1)}\right) K'_m(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_m(\sigma) \right] + \dots + \\ + K_m(t, \tau_1, \sigma) \left[\left(1 + B_1^{(m-1)}\right) K_1^{(m-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \times \right. \\ \times \tilde{\varphi}_1(\sigma) + \dots + \left(1 + B_1^{(m-1)}\right) K_m^{(m-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \tilde{\varphi}_m(\sigma) \Big]. \end{aligned}$$

Згрупувавши доданки біля функцій $\widetilde{\varphi}_1(\sigma), \dots, \widetilde{\varphi}_m(\sigma)$, будемо мати зображення ємо розв'язку

$$V(t, \sigma) = \widetilde{\varphi}_1(\sigma) \left[K_1(t, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(0)} \right) \times \right. \\ \times K_1(\tau_1, \tau_0, \sigma) + K_2(t, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(1)} \right) \times \\ \times K_1'(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + K_m(t, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(m-1)} \right) \times \\ \times K_1^{(m-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \left. \right] + \dots + \widetilde{\varphi}_m(\sigma) \left[K_1(t, \tau_1, \sigma) \times \right. \\ \times \left(1 + B_1^{(0)} \right) K_m(\tau_1, \tau_0, \sigma) + K_2(t, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(1)} \right) \times \\ \times K_m'(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + K_m(t, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(m-1)} \right) \times \\ \times K_m^{(m-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \left. \right],$$

або

$$V(t, \sigma) = \widetilde{\varphi}_1(\sigma) \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}(t, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) \times \\ \times K_1^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + \widetilde{\varphi}_m(\sigma) \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}(t, \tau_1, \sigma) \times \\ \times \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_m^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma).$$

Побудуємо розв'язок даної задачі на проміжку $t \in (\tau_2, \tau_3)$, причому розв'язок рівняння (5) на цьому проміжку має вигляд

$$V(t, \sigma) = K(t, \tau_2, \sigma) \cdot c. \quad (12)$$

Задовольнимо умови (7), звідки отримаємо

$$c_1 = \left(1 + B_2^{(0)} \right) \left[\widetilde{\varphi}_1(\sigma) \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \times \right. \\ \times \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_1^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + \widetilde{\varphi}_m(\sigma) \times \\ \times \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_m^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \left. \right], \\ \dots \\ c_m = \left(1 + B_2^{(m-1)} \right) \left[\widetilde{\varphi}_1(\sigma) \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}^{(m-1)}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \times \right. \\ \times \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_1^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + \widetilde{\varphi}_m(\sigma) \times \\ \times \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}^{(m-1)}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_m^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \left. \right].$$

$$V(t, \sigma) = \widetilde{\varphi}_1(\sigma) \left[K_1(t, \tau_2, \sigma) \left(1 + B_2^{(0)} \right) \times \right. \\ \times \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_1^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + \\ + K_m(t, \tau_2, \sigma) \left(1 + B_2^{(m-1)} \right) \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}^{(m-1)}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \times \\ \times \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_1^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \left. \right] + \dots + \widetilde{\varphi}_m(\sigma) \times \\ \times \left[K_1(t, \tau_2, \sigma) \left(1 + B_2^{(0)} \right) \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \left(1 + \right. \right. \\ \left. \left. + B_1^{(i_1-1)} \right) K_m^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + K_m(t, \tau_2, \sigma) \times \right. \\ \times \left(1 + B_2^{(m-1)} \right) \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}^{(m-1)}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \times \\ \times \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_m^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) \left. \right],$$

або

$$V(t, \sigma) = \widetilde{\varphi}_1(\sigma) \sum_{i_2=1}^m K_{i_2}(t, \tau_2, \sigma) \left(1 + B_2^{(i_2-1)} \right) \times \\ \times \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}^{(i_2-1)}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_1^{(i_1-1)}(\tau_1, \\ \tau_0, \sigma) + \dots + \widetilde{\varphi}_m(\sigma) \sum_{i_2=1}^m K_{i_2}(t, \tau_2, \sigma) \left(1 + B_2^{(i_2-1)} \right) \times \\ \times \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}^{(i_2-1)}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) K_m^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma).$$

Продовжуючи аналогічні міркування, розв'язок задачі (5)–(7) на проміжку $t \in (\tau_l, \tau_{l+1})$ можна записати у вигляді

$$V(t, \sigma) = \widetilde{\varphi}_i(\sigma) \sum_{i_l=1}^m K_{i_l}(t, \tau_l, \sigma) \left(1 + B_l^{(i_l-1)} \right) \dots \\ \times \sum_{i_2=1}^m K_{i_2}^{(i_3-1)}(\tau_3, \tau_2, \sigma) \left(1 + B_2^{(i_2-1)} \right) \times \\ \times \sum_{i_1=1}^m K_{i_1}^{(i_2-1)}(\tau_2, \tau_1, \sigma) \left(1 + B_1^{(i_1-1)} \right) \times \\ \times K_1^{(i_1-1)}(\tau_1, \tau_0, \sigma) + \dots + \widetilde{\varphi}_m(\sigma) \sum_{i_l=1}^m K_{i_l}(t, \tau_l, \sigma) \times$$

УДК 539.3

Володимир І. Острик, д.ф.-м.н., доцент
Ольга М. Шокотова, аспірантка

Ковзний контакт жорсткого диска з пружним клином

Розглянуто контакт з тертям жорсткого диска, який рівномірно обертається, з пружним клином. Одна з граней пружного клина закріплена, а обід диска вдавлюється у незакріплену грань клина в околі його вершини. Методом Вінера - Гопфа отримано точний аналітичний розв'язок задачі. Знайдено розподіли напружень в області контакту та на закріпленій грані клина, а також переміщення вільної межі клина.

Ключові слова: пружний клин, тертя, метод Вінера - Гопфа, напруження, переміщення.

E-mail: ostrik_v@rambler.ru, schekotova@list.ru

Статтю представив член редколегії д.ф.-м.н., професор Мелешко В.В.

1 Вступ

Ганіше [1] методом Вінера - Гопфа розв'язано задачу про гладкий контакт жорсткого диска з пружним клином, одна грань якого жорстко закріплена. У даній роботі ця задача узагальнена на випадок контакту з тертям за умови повного проковзування між ободом диска і поверхнею клина.

2 Постановка задачі

У полярній системі координат розглянемо взаємодію жорсткого диска радіуса R , який знаходиться у рівномірному обертотому русі, та пружного клина $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \vartheta \leq \alpha$, нижня грань $\vartheta = 0$ якого закріплена (рис. 1). Диск силою P , яка прикладена до його центра, здавлюється у грань $\vartheta = \alpha$ поблизу вершини клина. Вважаємо, що в області контакту $0 \leq r \leq l$ ($\vartheta = \alpha$), нормальні та дотичні напруження зв'язані законом тертя Амонтона (Кулона). У такому разі має місце повне проковзування вздовж усієї області контакту.

Volodymyr I. Ostriuk, D.Sci. (Phys.-Math.),
Associate Prof.

Olga M. Schokotova, PhD student

Slipping contact of hard disk with elastic wedge

The contact with friction of hard disk, which uniformly rotating, and elastic wedge is considered. One side of the wedge is fixed. Rim of the disk is pressed into the free side of the wedge in the vicinity of its top. Using the method of Wiener - Hopf received the analytic solution of the problem. The distribution of stresses in contact domain and fixed facet of the wedge, as well as the displacements on free boundary of the wedge were found.

Key Words: elastic wedge, friction, method of Wiener - Hopf, stresses, displacements.

Головний вектор дотичних контактних зусиль складає $\mu_0 P$, де μ_0 - коефіцієнт тертя між поверхнею клина та ободом диска.

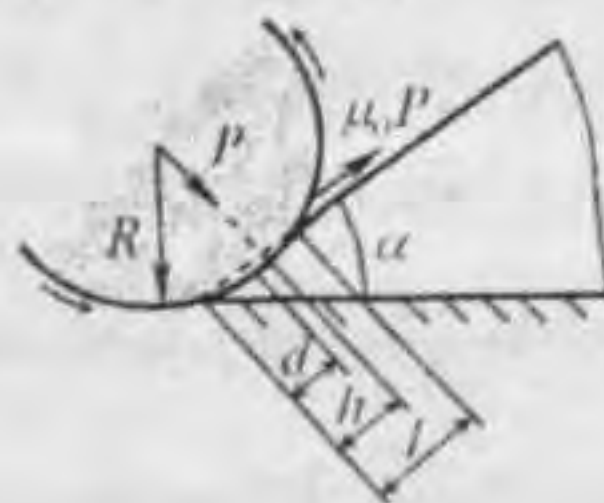


Рис. 1

Невідомими параметрами задачі є розмір l області контакту, відстань h від вершини клина до лінії дії сили P та радіальна координата d точки найбільшого занурення обода диска у пружний клин.

Граничні умови задачі мають вигляд

$$\begin{aligned} u_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} &= \frac{1}{2R}r(r-2d), \\ \tau_{r\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} &= -\mu_0 \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} \quad (0 \leq r \leq l), \\ \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} &= 0, \quad \tau_{r\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} = 0 \quad (l < r < \infty), \end{aligned}$$

$$u_r|_{\vartheta=0} = 0, \quad u_\vartheta|_{\vartheta=0} = 0 \quad (0 \leq r < \infty). \quad (1)$$

Крім того повинні виконуватись умови рівноваги диска

$$\int_0^l \sigma_\vartheta|_{\vartheta=\alpha} dr = -P, \quad \int_0^l r \sigma_\vartheta|_{\vartheta=\alpha} dr = -Ph. \quad (2)$$

3 Інтегральне рівняння

Введемо невідому функцію контактних напружень $g(r) = (2G)^{-1} \sigma_\vartheta|_{\vartheta=\alpha}$ ($0 < r < l$), де G – модуль зсуву, та її перетворення Мелліна

$$a(s) = \int_0^l g(y) y^s dy. \quad (3)$$

Розв'язок основної змішаної задачі для клина, коли на грані $\vartheta = \alpha$ задано нормальні напруження і дотичні напруження зв'язані з нормальними другою умовою (1), а на грані $\vartheta = 0$ задано нульові переміщення, отримаємо за допомогою інтегрального перетворення Мелліна. На гранях клина маємо:

$$\begin{Bmatrix} u_\vartheta|_{\vartheta=\alpha} \\ u_r|_{\vartheta=\alpha} \end{Bmatrix} = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \begin{Bmatrix} M(s) \\ 2M^*(s) \end{Bmatrix} a(s) r^{-s} ds,$$

$$\frac{\sigma_\vartheta}{2G}|_{\vartheta=\alpha} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\tau_{r\vartheta}}{2G}|_{\vartheta=\alpha} = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} a(s) r^{-s-1} ds,$$

$$\frac{1}{2G} \begin{Bmatrix} \sigma_\vartheta|_{\vartheta=0} \\ \tau_{r\vartheta}|_{\vartheta=0} \end{Bmatrix} = \frac{1}{\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \begin{Bmatrix} \tilde{M}(s) \\ \tilde{M}^*(s) \end{Bmatrix} a(s) r^{-s-1} ds,$$

$$M(s) = 2(m-1) \frac{\lambda(s)}{s\Delta(s)}, \quad M^*(s) = (m-1) \frac{\lambda^*(s)}{s\Delta(s)},$$

$$\tilde{M}(s) = 2(m-1) \frac{\tilde{\lambda}(s)}{\Delta(s)}, \quad \tilde{M}^*(s) = 2(m-1) \frac{\tilde{\lambda}^*(s)}{\Delta(s)},$$

$$\lambda(s) = (3m-4) \sin 2s\alpha - ms \sin 2\alpha +$$

$$+\mu_0 \left[\frac{(3m-4)(m-2)}{m-1} \sin^2 s\alpha - ms \left(\frac{ms}{n-1} - 2 \right) \sin^2 \alpha \right],$$

$$\lambda^*(s) = \frac{(3m-4)(m-2)}{m-1} \sin^2 s\alpha - ms \left(\frac{ms}{n-1} + 2 \right) \sin^2 \alpha -$$

$$-\mu_0 [(3m-4) \sin 2s\alpha + ms \sin 2\alpha],$$

$$\tilde{\lambda}(s) = 2(m-1) \cos \alpha \cos s\alpha - (ms - m + 2) \sin \alpha \sin s\alpha +$$

$$+\mu_0 [(m-2) \cos \alpha \sin s\alpha + (ms - 2m + 2) \sin \alpha \cos s\alpha],$$

$$\tilde{\lambda}^*(s) = (m-2) \cos \alpha \sin s\alpha - (ms + 2m - 2) \sin \alpha \cos s\alpha -$$

$$-\mu_0 [2(m-1) \cos \alpha \cos s\alpha + (ms + m - 2) \sin \alpha \sin s\alpha],$$

$$\Delta(s) = (3m-4)m(\cos 2s\alpha - 1) -$$

$$-2m^2 s^2 \sin^2 \alpha + 8(m-1)^2 \quad (-1 < c < \delta_1), \quad (4)$$

де δ_1 – найменший корінь рівняння $\Delta(s) = 0$ із півплощини $\text{Res} > 0$, m – число Пуассона.

Розв'язок (4) задовольняє всі крайові умови (1), окрім першої. Підставимо в цю умову вираз для окружних переміщень із (4). Після заміни змінних $r = le^{-\xi}$, $y = le^{-\eta}$ та введення нової невідомої функції $\varphi(\eta) = g(le^{-\eta})e^{-\eta}$ отримаємо інтегральне рівняння з різницеvim ядром на лівосі

$$\int_0^\infty k(\xi - \eta) \varphi(\eta) d\eta = f(\xi) \quad (0 \leq \xi < \infty), \quad (5)$$

$$k(\xi - \eta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty K(\tau) e^{-i\tau(\xi - \eta)} d\tau, \quad K(\tau) = \frac{\lambda(-iz)}{-iz\Delta(-iz)},$$

$$f(\xi) = -\frac{l}{4(m-1)R} e^{-\xi} \left(2\frac{d}{l} - e^{-\xi} \right).$$

4 Розв'язання інтегрального рівняння

За схемою роботи [1] знайдемо розв'язок інтегрального рівняння (5) зведенням його до функціонального рівняння Вінера – Гопфа [2]

$$K(z)\Phi^+(z) - \Phi^-(z) = F^+(z), \quad (6)$$

$$F^+(z) = \frac{Al}{iR} \left(2\frac{d}{l} \frac{1}{z+i} - \frac{1}{z+2i} \right), \quad A = \frac{1}{4\sqrt{2\pi(m-1)}}$$

Факторизацію коефіцієнта $K(z) = K^+(z) \times K^-(z)$ виконуємо у нескінченних добутках

$$K^+(z) = K(0) \prod_{n=1}^\infty \left(1 - \frac{z}{is'_n} \right) \left(1 + \frac{z}{i\delta_n} \right)^{-1}, \quad (7)$$

$$K^-(z) = \prod_{n=1}^\infty \left(1 - \frac{z}{is_n} \right) \left(1 - \frac{z}{i\delta_n} \right)^{-1},$$

де s_n і s'_n ($n = 1, 2, \dots$) – корені із півплощини $\text{Res} > 0$ та $\text{Res} < 0$ рівняння $\lambda(s) = 0$, δ_n – корені рівняння $\Delta(s) = 0$ із півплощини $\text{Res} > 0$. Праву частину рівняння (6), віднесено до функції $K^-(z)$, подамо різницею аналітичних функцій

$$F^+(z)/K^-(z) = f^+(z) - f^-(z), \quad f^+(z) =$$

$$= \frac{Al}{iR} \left[2\frac{d}{l} \frac{1}{K^-(i)(z+i)} - \frac{1}{K^-(i)(z+2i)} \right], \quad (8)$$

Отже, розв'язок функціонального рівняння (6) знаходимо у вигляді [2]

$$\Phi^+(z) = f^+(z)/K^+(z), \quad \Phi^-(z) = K^-(z)f^-(z) \quad (9)$$

та отримуємо [1] розв'язок інтегрального рівняння (5):

$$\varphi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^+(t) e^{-i\xi t} dt \quad (\xi \geq 0). \quad (10)$$

5 Напруження та переміщення на межі клина

Перетворюючи інтеграл із (10) за теорією лишків, одержуємо вираз для контактних напружень

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_\theta}{2G} \Big|_{\theta=\alpha} = & \frac{1}{4(m-1)R} \left(\frac{r}{K(-2i)} - \frac{2d}{K(-i)} \right) - \\ & - \frac{l}{4(m-1)R} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{s'_k \Delta(s'_k) K^-(is'_k)}{\lambda'(s'_k)} \times \\ & \times \left[2 \frac{d}{l} \frac{1}{K^-(i)(s'_k+1)} - \frac{1}{K^-(2i)(s'_k+2)} \right] \left(\frac{r}{l} \right)^{-s'_k-1}. \end{aligned} \quad (11)$$

Переміщення точок верхньої грані клина знайдемо з першого співвідношення (4). Перетворивши відповідні інтеграли за теорією лишків, отримуємо

$$\begin{aligned} u_\theta \Big|_{\theta=\alpha} = & \frac{l^2}{2R} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda(\delta_k) c_k}{\delta_k \Delta'(\delta_k) K^+(i\delta_k)} \left(\frac{r}{l} \right)^{-\delta_k}, \\ u_r \Big|_{\theta=\alpha} = & \frac{l^2}{2R} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^*(\delta_k) c_k}{\delta_k \Delta'(\delta_k) K^+(i\delta_k)} \left(\frac{r}{l} \right)^{-\delta_k} \\ & (l < r < \infty), \\ u_r \Big|_{\theta=\alpha} = & - \frac{\lambda^*(-1)}{\lambda(-1)} \frac{d}{R} r + \frac{\lambda^*(-2)}{\lambda(-2)} \frac{r^2}{2R} - \\ & - \frac{l^2}{2R} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^*(s'_k) K^-(is'_k)}{\lambda'(s'_k)} \left[2 \frac{d}{l} \frac{1}{K^-(i)(s'_k+1)} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{K^-(2i)(s'_k+2)} \right] \left(\frac{r}{l} \right)^{-s'_k} \quad (0 < r < l), \\ c_k = & 2 \frac{d}{l} \frac{1}{K^-(i)(\delta_k+1)} - \frac{1}{K^-(2i)(\delta_k+2)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Із (4) отримуємо напруження на закріпле-

ній грані клина

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_\theta}{2G} \Big|_{\theta=0} = & \frac{l}{R} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\lambda}(-it) \chi(t)}{\Delta(it) K^+(t)} \left(\frac{r}{l} \right)^{it-1} dt, \\ \frac{\tau_{r\theta}}{2G} \Big|_{\theta=0} = & \frac{l}{R} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\lambda}^*(-it) \chi(t)}{\Delta(it) K^+(t)} \left(\frac{r}{l} \right)^{it-1} dt, \\ \chi(t) = & 2 \frac{d}{l} \frac{1}{K^-(i)(t+1)} - \frac{1}{K^-(2i)(t+2)}. \end{aligned} \quad (13)$$

З умови обмеженості контактних напружень [1] визначаємо точку найбільшого занурення диска $d=kl$, $k=K^-(i)/(2K^-(2i))$.

З умов рівноваги диска (2) знаходимо [1] розмір області контакту та плече прикладеної до штампа сили

$$\begin{aligned} l = & k_1 \sqrt{PR/(2G)}, \quad h = k_2 l, \\ k_1^2 = & 8(m-1)K(0)K^-(2i), \quad k_2 = \frac{K(0)}{3K^+(i)}. \end{aligned} \quad (14)$$

6 Результати розрахунків

На рис. 2-6 представлено результати обчислень напружень та переміщень на межі пружного клина у випадку числа Пуассона $m=10/3$. Суцільні криві відповідають значенню кута розхилу клина $\alpha=\pi/4$, пунктирні – $\alpha=\pi/6$. Криві 1, 2, 3 – коефіцієнту тертя $\mu_0=0, 0.25, 0.5$.

Розподіл безрозмірних контактних напружень $\bar{\sigma}=lP^{-1}\sigma_\theta|_{\theta=\alpha}$ подано на рис. 2. Напруження при вершині клина приймають ненульові значення і змінюються з необмеженим градієнтом.

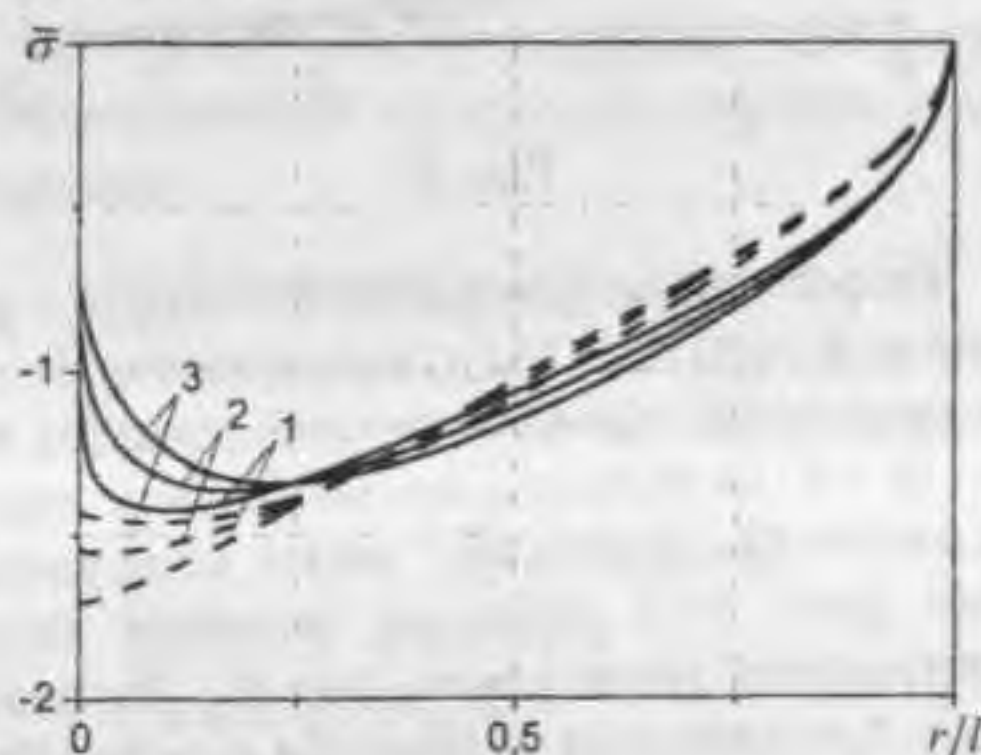


Рис. 2

На рис. 3 і 4 представлено розподіли безрозмірних нормальних $\bar{\sigma}=lP^{-1}\sigma_\theta|_{\theta=0}$ і дотичних $\bar{\tau}=lP^{-1}\tau_{r\theta}|_{\theta=0}$ напружень на

жорстко закріпленій грані клина. Через зсув пружного матеріалу ободом диска (за наявності тертя) на закріпленій грані клина з кутом $\alpha = \pi/4$ в околі вершини виникають напруження розтягу. Із зменшенням кута розхиду клина цей ефект зникає, і для клина з кутом $\alpha = \pi/6$ має місце притискання матеріалу уздовж усієї нижньої грані. Спостерігається різке підвищення дотичних напружень у вершині клина, яке посилюється наявністю тертя.

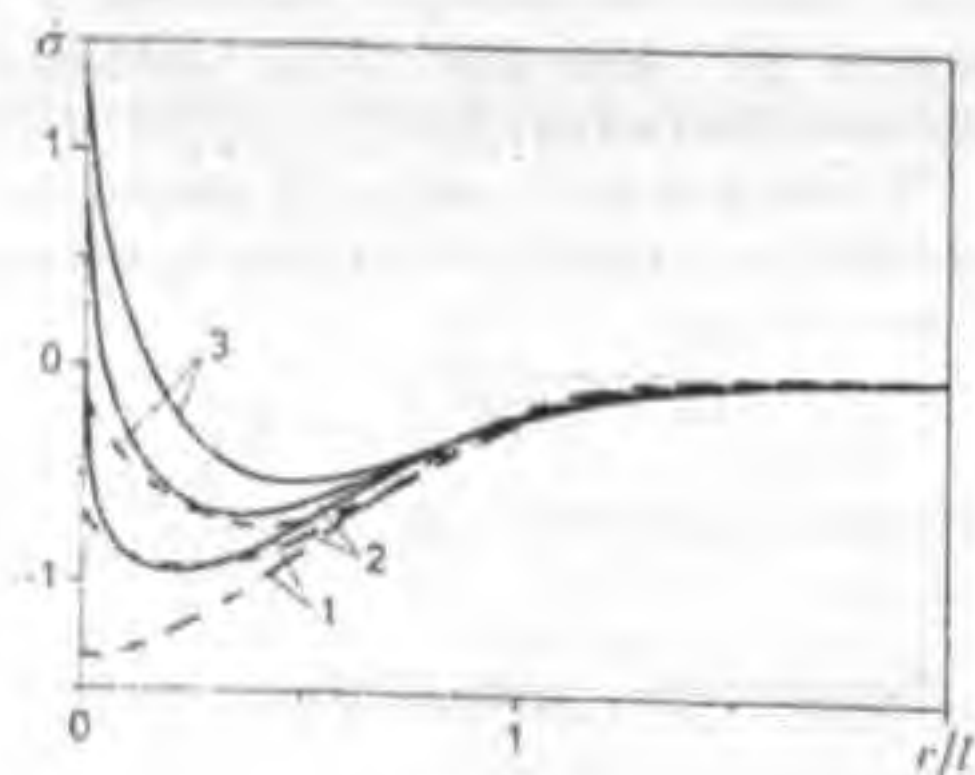


Рис. 3

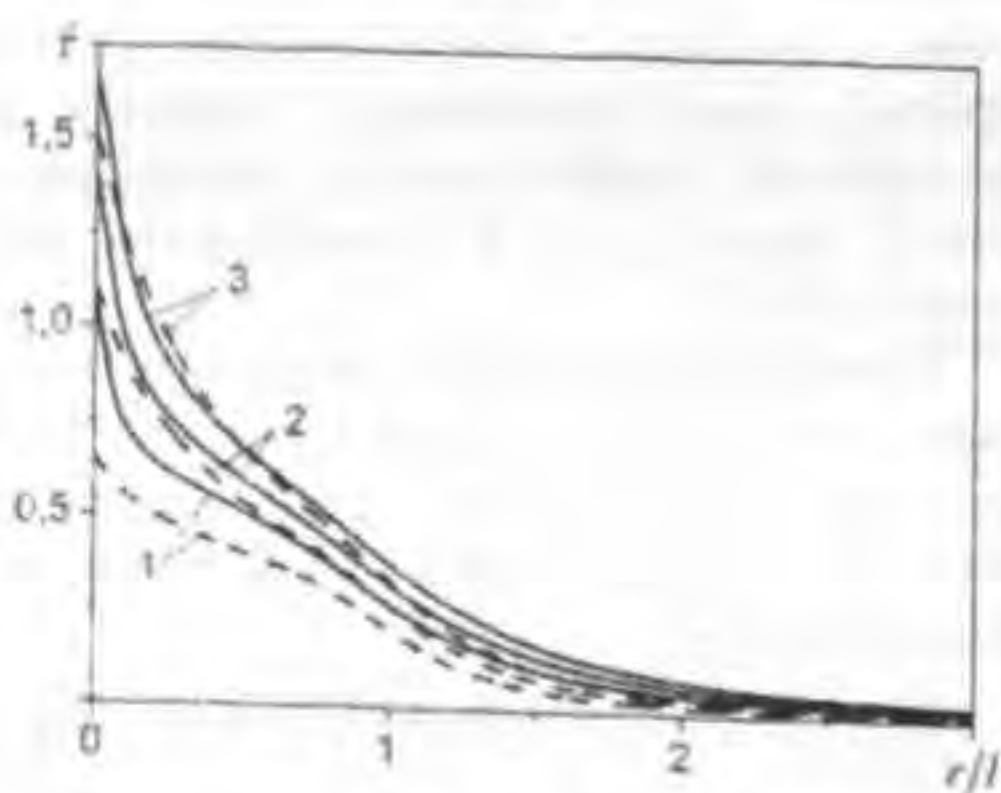


Рис. 4

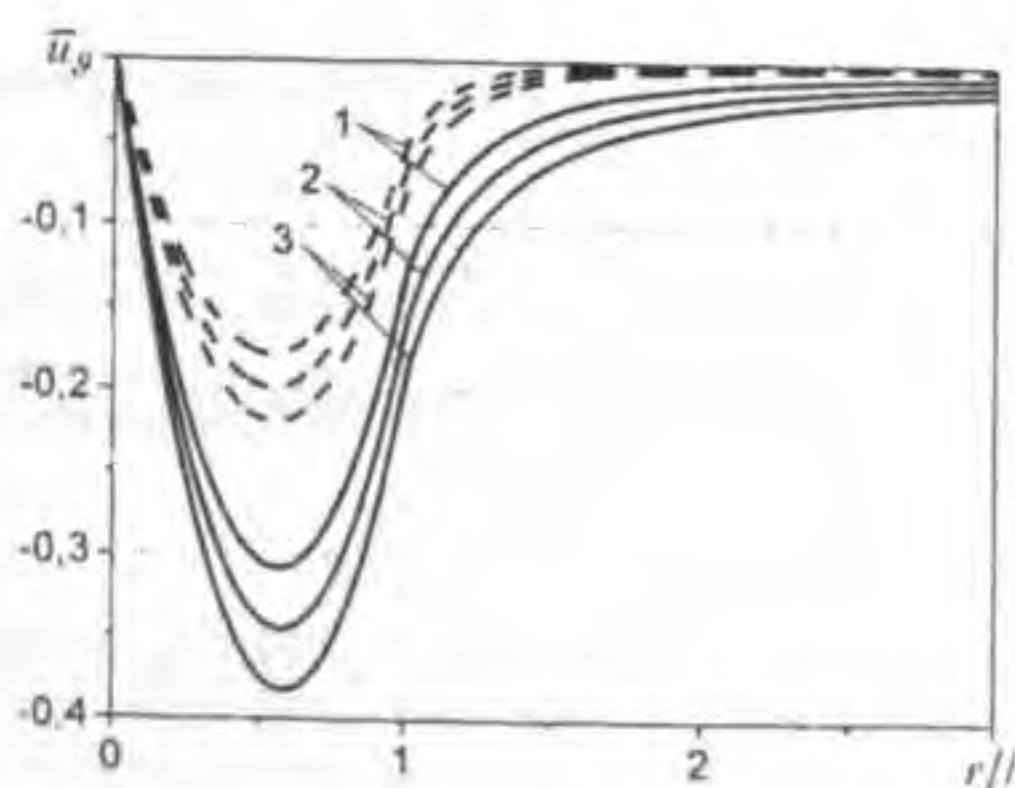


Рис. 5

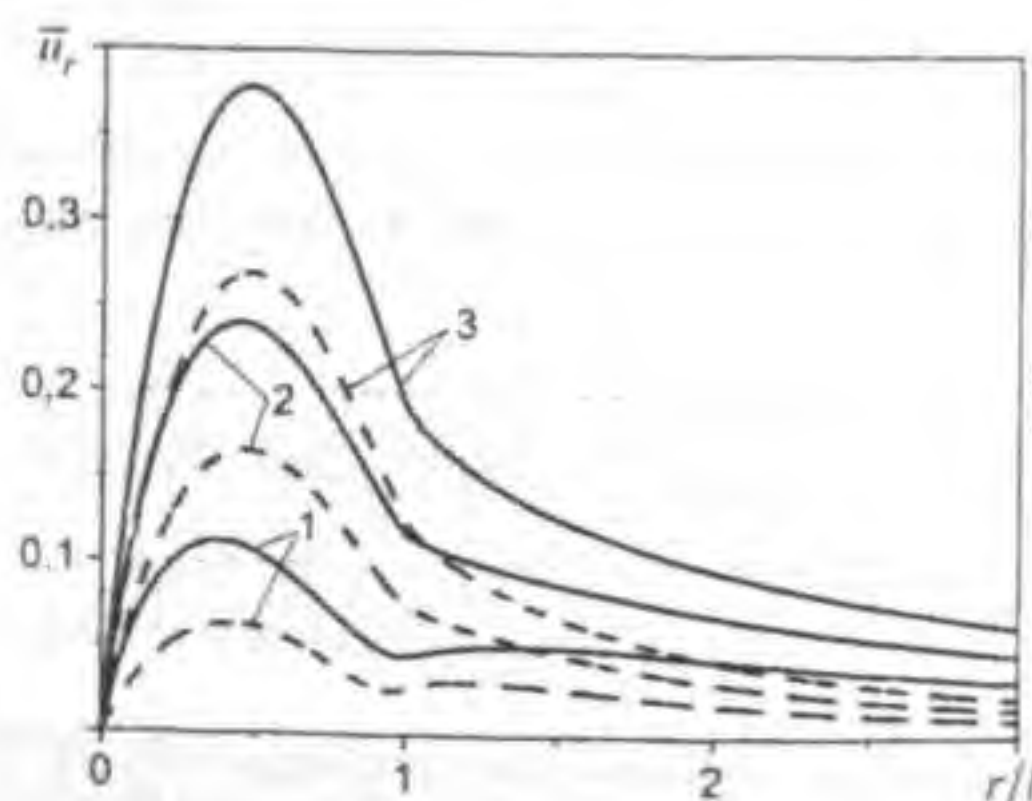


Рис. 6

7 Висновки

Методом Вінера – Гопфа отримано точний аналітичний розв'язок задачі про ковзний контакт жорсткого диска, який рівномірно обертається, з пружним клином. Проаналізовано вплив тертя на розподіли контактних напружень та напружень на закріпленій грані клина, а також переміщення точок незакріпленої грані пружного клина.

Список використаних джерел

1. Острик В. І., Щокотова О. М. Гладкий контакт жорсткого диска з пружним клином // Вісник Київ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. науки. – 2010. – Вип. 1. – С. 37-42.
2. Ноба Б. Метод Винера – Хопфа. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962. – 280 с.

Надійшла до редколегії 08.08.2010

Безрозмірні колові $\bar{u}_\theta = 2GP^{-1} u_\theta|_{\theta=\alpha}$ і радіальні $\bar{u}_r = 2GP^{-1} u_r|_{\theta=\alpha}$ переміщення точок верхньої грані пружного клина показано на рис. 5 і 6. Із збільшенням коефіцієнту тертя збільшується просідання диска у пружний клин (рис. 5) і радіальне зміщення точок незакріпленої грані клина (рис. 6). Як видно із рис. 6, повздовжня деформація $\epsilon_r = \partial u_r / \partial r$ є деформацією розтягу ($\epsilon_r > 0$) на лівій половині області контакту і деформацією стиску ($\epsilon_r < 0$) на правій.

УДК 517.98

Вікторія М. Романенко, аспірантка

Апроксимація обмежених розв'язків різницевого рівняння старших порядків

Отримані достатні умови наближення обмеженого розв'язку лінійного різницевого рівняння в банаховому просторі розв'язками відповідних задач Коші. Оцінена швидкість наближення.

Ключові слова: лінійне різницеве рівняння, банахів простір, задача Коші.

Romser1@bigmir.net

Статтю представив доктор ф.-м.н., професор, академік НАН України М.О. Перестюк

Вступ.

Нехай $(B, \|\cdot\|)$ – комплексний банахів простір з нульовим елементом $\vec{0}$, $L(B)$ – простір усіх лінійних неперервних операторів в B , I – одиничний оператор, $S := \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$.

Нехай також $A_0 : D(A_0) \subset B \rightarrow B$ – замкнений оператор, $\{A_1, \dots, A_{m-1}\} \subset L(B)$. Нехай виконується

Припущення 1. Оператори $A_1, A_2, \dots, A_{m-1}$ попарно комутують, а також

$$\forall k, 1 \leq k \leq m-1 : A_k : B \rightarrow D(A_0),$$

$$A_0 A_k = A_k A_0 \text{ на } D(A_0).$$

Розглянемо різницеве рівняння

$$x(n+1) = \sum_{k=0}^{m-1} A_k x(n-k) + y(n), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (1)$$

де $y := \{y(n) : n \in \mathbb{Z}\}$ – відома обмежена послідовність елементів B , $x := \{x(n) : n \in \mathbb{Z}\}$ – шукана обмежена послідовність елементів B .

В роботі [1] розглянуте аналогічне рівняння першого порядку

$$x(n+1) = A_0 x(n) + y(n), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2)$$

За умови, що спектр $\sigma(A_0)$ не перетинається з S , простір B розкладається в пряму суму підпросторів B_+ та B_- , що відповідають частинам спектра $\sigma(A_0)$, що лежать відповідно ззовні та всередині S .

V. M. Romanenko, PhD student

Approximation of bounded solutions of difference equation of higher orders

Sufficient conditions are obtained for approximation of bounded solution of linear difference equation in Banach space with solutions of corresponding Cauchy problems. Rate of approximation is estimated.

Key words: linear difference equation, Banach space, Cauchy problem.

Теорема 1. [1] Нехай

$$\sigma(A_0) \cap S = \emptyset,$$

$y = \{y(n) : n \in \mathbb{Z}\}$ – фіксована обмежена послідовність елементів B , $x = \{x(n) : n \in \mathbb{Z}\}$ – єдиний обмежений розв'язок різницевого рівняння (2), відповідний послідовності y . Тоді існують числа $q_{\pm} \in (0, 1)$, $N_{\pm} \in \mathbb{N}$ такі, що для всіх $\alpha_- \in B_-$, $\alpha_+ \in B_+$, а також для всіх натуральних чисел m, k , які задовольняють умови $m \geq \max\{N_+, N_-\}$, $N_- \leq k \leq 2m - N_+$, справедлива нерівність

$$\|x(-m+k) - u(-m+k)\| \leq$$

$$q_-^k \|x(-m) - \alpha_-\| + q_+^{2m-k} \|x(m) - \alpha_+\|.$$

В даній статті результат цієї теореми узагальнюються на випадок рівнянь старших порядків.

Апроксимація розв'язку.

Спочатку зауважимо, що різницеве рівняння (1) еквівалентне такій системі рівнянь:

$$\begin{cases} x(n+1) = \sum_{k=0}^{m-1} A_k v_k(n), \\ x(n-1) = v_1(n), \\ x(n-2) = v_2(n), \\ \dots \\ x(n-m+1) = v_{m-1}(n), \end{cases} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (3)$$

Позначимо через B^m декартів добуток m екземплярів простору B ; B^m – банахів простір

з покоординатним додаванням і множенням на скаляр та нормою

$$\|\vec{z}\|_m := \max_{1 \leq k \leq m} \|z_k\|, \quad \vec{z} = (z_1, \dots, z_m) \in B^m.$$

З урахуванням правил матричного числення система (3) записується в цьому просторі таким чином:

$$\vec{z}(n+1) = A\vec{z}(n) + \vec{y}(n), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4)$$

$$\vec{z}(n) = \begin{pmatrix} x(n) \\ v_1(n) \\ \vdots \\ v_{m-1}(n) \end{pmatrix}, \quad \vec{y}(n) = \begin{pmatrix} y(n) \\ \vec{0} \\ \vdots \\ \vec{0} \end{pmatrix},$$

$$A = \begin{pmatrix} A_0 & A_1 & \dots & A_{m-1} \\ I & O & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & I & O \end{pmatrix},$$

причому на незаповнених місцях матриці A знаходяться нульові оператори. Матриця A визначає в просторі B^m оператор, який теж позначатимемо буквою A , з областю визначення

$$D(A) := \{\vec{w} \in B^m \mid w_1 \in D(A_0)\}.$$

Використовуючи означення, легко показати замкненість цього оператора.

Припустимо, що спектр $\sigma(A)$ оператора A не перетинається з одиничним колом S .

Нехай σ_- – частина спектра $\sigma(A)$, що міститься всередині S ; $\sigma_+ := \sigma(A) \setminus \sigma_-$, σ_- та σ_+ – непорожні множини. Тоді простір B^m розкладається в пряму суму інваріантних відносно оператора A підпросторів $B_{\pm}^m$; звуження оператора A на $B_{\pm}^m$ мають відповідно спектри $\sigma_{\pm}$; A_- – лінійний обмежений оператор; A_+ – замкнений оператор, який має обмежений обернений оператор, причому $\sigma(A_+^{-1})$ лежить всередині S . Нехай $P_{\pm}$ – проектори в B^m відповідно на простори $B_{\pm}^m$.

Покладемо $\vec{y}_{\pm} := P_{\pm} \vec{y}$.

В [2, с. 14] показано, що різницеве рівняння (4) має єдиний обмежений розв'язок $\vec{z}$, відповідний послідовності $\vec{y}$. При цьому рівняння (1) має єдиний обмежений розв'язок $\vec{x}$, відповідний послідовності $\vec{y}$. Розв'язок $\vec{z}$ зображується у вигляді

$$\vec{z} = \vec{z}_- + \vec{z}_+, \quad (5)$$

$$\vec{z}_-(n) = \sum_{j=0}^{+\infty} A_-^j P_- \vec{y}(n-1-j), \quad n \in \mathbb{Z},$$

$$\vec{z}_+(n) = - \sum_{j=-\infty}^{-1} A_+^j P_+ \vec{y}(n-1-j), \quad n \in \mathbb{Z},$$

причому ряди збіжні за нормою.

Відмітимо, що $\vec{z}_{\pm}$ – відповідні обмеженим послідовностям $\vec{y}_{\pm}$ єдині обмежені розв'язки рівнянь

$$\vec{z}_-(n+1) = A_- \vec{z}_-(n) + \vec{y}_-(n), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (6)$$

$$\vec{z}_+(n+1) = A_+ \vec{z}_+(n) + \vec{y}_+(n), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (7)$$

у просторах $B_{\pm}^m$.

Оскільки спектральні радіуси операторів A_- та A_+^{-1} менші за одиницю, то знайдуться такі числа $q_{\pm} \in (0, 1)$, $N_{\pm} \in \mathbb{N}$, що

$$\begin{aligned} \forall n \geq N_- : \|A_-^n\| &\leq q_-^n, \\ \forall n \geq N_+ : \|A_+^n\| &\leq q_+^n. \end{aligned} \quad (8)$$

Зафіксуємо $m \geq \max\{N_-, N_+\}$. Рівнянню (6) в просторі B_-^m відповідає задача Коші

$$\begin{cases} \vec{u}_-(-m+k) = \\ = A_- \vec{u}_-(-m+k-1) + \\ + \vec{y}_-(-m+k-1), \quad k \geq 1, \\ \vec{u}_-(-m) = \vec{\alpha}_-. \end{cases} \quad (9)$$

Тут $\vec{\alpha}_-$ – фіксований елемент з B_-^m . Врахуємо, що

$$A_- \vec{u}_-(k) = A P_- \vec{u}_-(k) = A \vec{u}_-(k), \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Позначимо

$$w_-(k) := (\vec{u}_-)_1(k), \quad k > -m,$$

та

$$w_-(k) := (\vec{\alpha}_-)_{-m-k+1}, \quad -2m+1 \leq k \leq -m.$$

Розписавши задачу (9) покоординатно, отримаємо

$$\begin{cases} (\vec{u}_-)_1(-m+k) = \\ = \sum_{j=0}^{m-1} A_j (\vec{u}_-)_{j+1}(-m+k-1) + \\ + (\vec{y}_-)_1(-m+k-1), \\ (\vec{u}_-)_p(-m+k) = w_-(-m+k-p+1), \\ k \geq 1, \quad 2 \leq p \leq m, \\ (\vec{u}_-)_p(-m) = (\vec{\alpha}_-)_p, \quad 1 \leq p \leq m. \end{cases}$$

Спрощуючи, одержимо

$$\begin{cases} w_-(-m+k) = \\ = \sum_{j=0}^{m-1} A_j w_-(-m+k-j-1) + \\ + (\tilde{y}_-)_1(-m+k-1), \quad k \geq 1, \\ w_-(k) = (\tilde{\alpha}_-)_m, \\ -2m+1 \leq k \leq -m. \end{cases} \quad (10)$$

Якщо існує A_{m-1}^{-1} , то безпосередньо можна переконатися, що оператор A має обернений оператор такого вигляду:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} O & I & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & O & I \\ A_{m-1}^{-1} & -A_0 A_{m-1}^{-1} & \dots & -A_{m-2} A_{m-1}^{-1} \end{pmatrix}.$$

При цьому різницевого рівнянню (7) в просторі B_+^m при фіксованому $\tilde{\alpha}_+$ відповідає задача Коші

$$\begin{cases} \tilde{u}_+(m-k) = A_+^{-1} \tilde{u}_+(m-k+1) - \\ - A_+^{-1} \tilde{y}_+(m-k), \quad k \geq 1, \\ \tilde{u}_+(m) = \tilde{\alpha}_+. \end{cases} \quad (11)$$

Позначимо

$$w_+(k) := (\tilde{u}_+)_1(k), \quad k < m,$$

та

$$w_+(k) := (\tilde{\alpha}_+)_m, \quad m \leq k \leq 2m-1.$$

Розписавши задачу (11) по координатах, отримаємо

$$\begin{cases} w_+(m-k+1) = \\ = A_{m-1}^{-1} w_+(m-k) - \\ - \sum_{p=0}^{m-2} A_p A_{m-1}^{-1} w_+(m-k-p+1) + \\ + (\tilde{y}_+)_1(m-k), \quad k \geq 1, \\ w_+(k) = (\tilde{\alpha}_+)_m, \\ m \leq k \leq 2m-1. \end{cases} \quad (12)$$

Зауважимо, що елементи

$$\tilde{u}_-(-m+k), \tilde{u}_+(m-k), \quad k \geq 1,$$

послідовно визначаються відповідно з (10) та (12). Покладемо

$$\tilde{u}(-m+k) := \tilde{u}_-(-m+k) + \tilde{u}_+(m-k), \quad (13) \\ 0 \leq k \leq 2m.$$

Відповідь на питання про можливість наближення обмеженого розв'язку $\tilde{z}$ різницевого рівняння (1) містить

Теорема 2. Нехай оператор

$$\Omega(z) := \sum_{k=0}^{m-1} A_k z^{m-k} - z^{m+1}$$

має неперервний обернений при кожному $z \in S$, існує $A_{m-1}^{-1} \in L(B)$, $y = \{y(n) : n \in \mathbb{Z}\}$ – фіксована обмежена послідовність елементів B , $x = \{x(n) : n \in \mathbb{Z}\}$ – єдиний обмежений розв'язок різницевого рівняння (1), відповідний послідовності y . Тоді існують залежні тільки від операторів $A_0, \dots, A_{m-1}$ числа $q_{\pm} \in (0, 1)$, $N_{\pm} \in \mathbb{N}$ такі, що для всіх $\tilde{\alpha}_- \in B_-^m$, $\tilde{\alpha}_+ \in B_+^m$, а також для всіх натуральних чисел m, k , які задовольняють умови $m \geq \max\{N_+, N_-\}$, $N_- \leq k \leq 2m - N_+$, справедлива нерівність

$$\|\tilde{z}(-m+k) - \tilde{u}(-m+k)\|_m \leq$$

$$q_-^k \|\tilde{z}_-(-m) - \tilde{\alpha}_-\|_m + q_+^{2m-k} \|\tilde{z}_+(m) - \tilde{\alpha}_+\|_m,$$

де елементи $\tilde{u}(-m+k)$, $0 \leq k \leq 2m$, визначаються за допомогою формул (10), (12), (13).

Доведення. З існування оберненого оператора для $\Omega(z)$, $z \in S$, випливає, що $\sigma(A) \cap S = \emptyset$. Дійсно, користуючись правилами матричного числення, можна показати, що визначник матриці $A - zI_m$, де I_m – одиничний оператор в просторі B^m , рівний $(-1)^m \Omega(z)$.

Отже, для всіх $z \in S$ оператор $A - zI_m$ має неперервний обернений.

Перевіримо, що твердження теореми виконується з числами $q_{\pm}, N_{\pm}$ з оцінок (8). З рівностей (6), (9) випливає, що для всіх натуральних чисел k правильні рівності

$$\begin{aligned} \|\tilde{z}_-(-m+k) - \tilde{u}_-(-m+k)\|_m &= \\ = \|A_- (\tilde{z}_-(-m+k-1) - \tilde{u}_-(-m+k-1))\|_m &= \dots = \\ = \|A_-^k (\tilde{z}_-(-m) - \tilde{u}_-(-m))\|_m, \end{aligned}$$

а отже, внаслідок (8),

$$\forall k \geq N_- : \|\tilde{z}_-(-m+k) - \tilde{u}_-(-m+k)\|_m \leq \\ \leq q_-^k \|\tilde{z}_-(-m) - \tilde{\alpha}_-\|_m.$$

Аналогічно, скориставшись рівностями (7), (11) та оцінкою (8), отримаємо

$$\forall k \geq N_+ : \|\tilde{z}_+(-m+k) - \tilde{u}_+(-m+k)\|_m \leq \\ \leq q_+^k \|\tilde{z}_+(-m) - \tilde{\alpha}_+\|_m.$$

З цих оцінок випливає твердження теореми. $\square$

Зауваження 1. З нерівності в теоремі 2 випливає оцінка, яка дозволяє наблизити єдиний обмежений розв'язок x різницевого рівняння (1). Дійсно, оскільки при кожному $n \in \mathbb{Z}$ $x(n)$ – це перша компонента вектора $\vec{z}(n)$, а $\|\vec{y}\|_m = \|y\|$, то для всіх натуральних чисел m, k , які задовольняють умови

$$m \geq \max\{N_-, N_+\}, \quad N_- \leq k \leq 2m - N_+,$$

справджується нерівність

$$\|x(-m+k) - u_1(-m+k)\|_m \leq q_-^k \|\vec{z}_-(-m) - \vec{\alpha}_-\|_m + q_+^{2m-k} \|\vec{z}_+(m) - \vec{\alpha}_+\|_m.$$

Зауваження 2. Внаслідок рівностей (6), (7) маємо

$$\sup_{n \in \mathbb{Z}} \|\vec{z}_+(n)\| \leq L_+, \\ \sup_{n \in \mathbb{Z}} \|\vec{z}_-(n)\| \leq L_-,$$

де

$$L_+ := \left(\sum_{j=-\infty}^{-1} \|A_+^j P_+\| \right) \sup_{n \in \mathbb{Z}} \|\vec{y}(n)\|, \\ L_- := \left(\sum_{j=0}^{+\infty} \|A_-^j P_-\| \right) \sup_{n \in \mathbb{Z}} \|\vec{y}(n)\|.$$

Тому з оцінки в теоремі випливає, що

$$\|\vec{z}(-m+k) - \vec{u}(-m+k)\|_m \leq q_-^k (L_- + \|\vec{\alpha}_-\|_m) + q_+^{2m-k} (L_+ + \|\vec{\alpha}_+\|_m).$$

Зауваження 3. Частинним випадком рівняння вигляду (1) є рівняння вигляду

$$\Delta^{(m)} x(n) + A_1 \Delta^{(m-1)} x(n) + \dots + A_{m-1} \Delta^{(1)} x(n) = A_0 x(n) + y(n), \quad n \in \mathbb{Z},$$

де

$$\Delta^{(1)} x(n) := x(n+1) - x(n-1), \\ \Delta^{(k+1)} x(n) :=$$

$$= \Delta^{(k)} x(n+1) - \Delta^{(k)} x(n-1), \quad k \geq 1, n \in \mathbb{Z}.$$

Для таких рівнянь в роботі [3] отриманий деякий аналог теореми 2, більш зручний у застосуванні.

Висновки.

Знайдені достатні умови апроксимації обмеженого розв'язку лінійного різницевого рівняння в банаховому просторі розв'язками відповідних задач Коші. Отримана оцінка швидкості наближення.

Список використаних джерел

1. Романенко В.М. Наближення обмежених розв'язків різницевого та диференціального рівнянь розв'язками відповідних задач Коші // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2002. – №2. – С. 142 - 147.
2. Дороговцев А.Я. Периодические и стационарные режимы бесконечных детерминированных и стохастических динамических систем. К.: Вища шк. – 1992. – 319с.
3. Городній М.Ф., Романенко В.М. Апроксимація обмеженого розв'язку одного різницевого рівняння з необмеженим операторним коефіцієнтом розв'язками відповідних крайових задач // Укр. мат. журн. – 2000. – т.52. – №4. – С. 548 - 552.

Надійшла до редколегії 29.04.2010

УДК 517.98

А. В. Чайковський, канд. фіз.-мат. наук

Періодичні розв'язки диференціальних рівнянь з G -секторіальним операторним коефіцієнтом

Отримані необхідні й достатні умови існування та єдиності періодичного розв'язку лінійного диференціального рівняння першого порядку в банаховому просторі з G -секторіальним операторним коефіцієнтом. Оцінена точність апроксимації цього розв'язку розв'язками відповідних різницьових рівнянь.

Ключові слова: лінійне диференціальне рівняння, банахів простір, G -секторіальний операторний коефіцієнт, періодичний розв'язок, наближення розв'язку.

ChaikovskiyAV@ukr.net

Статтю представив доктор ф.-м.н., професор, академік НАН України М.О. Перестюк

Вступ.

Нехай $(B, \|\cdot\|)$ – комплексний банахів простір з нульовим елементом $\vec{0}$, $L(B)$ – простір усіх лінійних неперервних операторів в B , I – одиничний оператор.

В [1, с. 119] доведено таке твердження.

Теорема (М. Г. Крейн). Нехай $T > 0$, $A \in L(B)$. Для того, щоб рівняння

$$x'(t) = Ax(t) + y(t), \quad t \in \mathbb{R}, \quad (1)$$

для кожної неперервної T -періодичної функції мало єдиний T -періодичний розв'язок, необхідно і достатньо, щоб

$$\sigma(A) \cap \left\{ \frac{2\pi ki}{T} \mid k \in \mathbb{Z} \right\} = \emptyset. \quad (2)$$

Позначимо через L_b клас усіх таких функцій $f : \mathbb{R} \rightarrow B$, для кожної з яких $\|f\|_\infty < +\infty$, а також існують залежні від f сталі $K = K_f > 0$, $\alpha = \alpha_f \in (0, 1]$, що

$$\forall t, s \in \mathbb{R} : \|f(t) - f(s)\| \leq K|t - s|^\alpha. \quad (3)$$

Рівнянню (1) відповідає набір залежних від параметра $\tau > 0$ різницьових рівнянь

$$u_{n+1} - u_{n-1} = 2\tau(Au_n + y(n\tau)), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (4)$$

A. V. Chaikovskiy, candidate of physics and mathematics sciences

Periodic solutions of differential equations with G -sectorial operator coefficient

Necessary and sufficient conditions are obtained for existence and uniqueness of periodic solution of linear differential equations of the first order in Banach space with G -sectorial operator coefficient. Precision is estimated for approximation of the solution with solutions of corresponding difference equations.

Key words: linear differential equation, Banach space, G -sectorial operator coefficient, periodic solution, approximation of solution.

В роботі [2] показано, що у випадку секторіального операторного коефіцієнта A за умови (2) рівняння (4) має для довільного $\tau > 0$ та довільної обмеженої послідовності $\{y(n\tau) : n \in \mathbb{Z}\}$ єдиний обмежений розв'язок u . Крім того, там доведена теорема, що дозволяє наблизити обмежені розв'язки диференціального рівняння (1) обмеженими розв'язками різницьових рівнянь (4) при малих $\tau > 0$:

Теорема (М.Ф. Городній). Нехай $f \in L_b$ і умова (3) задовольняється зі сталими K, α . Припустимо, що виконується умова (2). Якщо x і при кожному $\tau > 0$ $u(\tau)$ – єдині обмежені розв'язки відповідно диференціального рівняння (1) та різницьового рівняння (4), то для кожного $\gamma \in (0, \alpha)$ справджується оцінка

$$\sup_{n \in \mathbb{Z}} \|x(n\tau) - u_n(\tau)\| = o(\tau^\gamma), \quad \tau \rightarrow 0. \quad (5)$$

Твердження теореми 2 розповсюджується, зокрема, і на періодичні функції.

В цій роботі аналогічні наведеним вище теоремам результати будуть отримані для періодичних функцій у випадку G -секторіальних операторів. Наведемо означення з роботи [3].

Означення 1. Будемо казати, що функція $G : [0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$ належить класу Ψ , якщо вона задовольняє умови:

- а) G – незростаюча на $[0, +\infty)$;
- б) $G(t) \rightarrow 0, t \rightarrow +\infty$;
- в) функція $1/G$ ліпшицева на $[0, +\infty)$.

Означення 2. Нехай $G \in \Psi$. Лінійний оператор $A : D(A) \subset B \rightarrow B$ назовемо G -секторіальним, якщо існують такі сталі $a \in \mathbb{R}$ і $\varphi \in (0, \frac{\pi}{2})$, що для множини $S_{a,\varphi} := \{z \in \mathbb{C} \mid z \neq a, |\arg(z - a)| < \varphi\}$ справджуються умови

- а) $\sigma(A) \subset S_{a,\varphi}$;
- б) $\exists M_0 > 0 \forall \lambda \notin S_{a,\varphi} : \|R_\lambda(A)\| \leq M_0 G(|\lambda - a|)$.

Нехай A – G -секторіальний оператор. В [3] вводиться операторна експонента $e^{-At}, t > 0$, доводяться її властивості. Деякі з них сформулюємо у вигляді леми.

Лема 1. Якщо A – G -секторіальний оператор і $H(t) := \frac{1}{t} G(\frac{1}{t}), t > 0$, то:

- 1) $\exists C_0 > 0 \forall t > 0 \|e^{-At}\| \leq C_0 H(t) e^{-at}$;
- 2) e^{-At} неперервно диференційовна при $t > 0$, сильно неперервна в т. 0 для елементів з $D(A)$;
- 3) $\exists C_1 > 0 \forall t > 0 \|Ae^{-At}\| \leq C_1 t^{-1} H(t) e^{-at}$;
- 4) $\exists C_2 > 0 \forall t_1, t_2, t_2 > t_1 > 0 :$
 $\|Ae^{-At_1} - Ae^{-At_2}\| \leq \frac{C_2(t_2 - t_1)}{t_1 t_2} e^{-at_1}$.

Нехай $T > 0$,

$$\Omega_0 := \left\{ \alpha > 0 \mid \int_0^1 s^{\alpha-1} H(s) ds < +\infty \right\},$$

$$U(t, \alpha) := \int_0^T H(s) s^{\alpha-2} \min\{t, s\} ds,$$

$$\alpha \in \Omega_0, t > 0.$$

Відмітимо деякі властивості функції U .

Лема 2. Справджуються оцінки:

- 1) $\forall \alpha \in \Omega_0 \cap (0, 1) \exists C_3 = C_3(\alpha) > 0 \forall t \in [0, T] :$
 $U(t, \alpha) \geq C_3 t^\alpha$;
- 2) $\forall \beta > 0 \exists C_4 = C_4(\beta) \forall \alpha \in \Omega_0 \forall t \in [0, T] :$
 $U(\beta t, \alpha) \leq C_4 U(t, \alpha)$.

Доведення. 1) В [2] показано, що $\exists C_H > 0 \forall t \in [0, T] : H(t) \geq C_H$, звідки випливає потрібна нерівність.

- 2) Досить покласти $C_4 := \max\{1, \beta\}$. $\square$

Узагальнення теореми М.Г. Крейна.

Надалі вважаємо, що A – G -секторіальний оператор, $T > 0$ – фіксоване.

Позначимо через X клас усіх T -періодичних функцій $x : \mathbb{R} \rightarrow D(A)$, які мають похідну в кожній точці, а через Y_1 клас усіх T -періодичних функцій $y \in C^1(\mathbb{R}, D(A))$.

Теорема 1. Нехай $1 \in \Omega_0$. Для того, щоб рівняння (1) мало для кожної функції $y \in Y_1$ єдиний розв'язок $x \in X$, необхідно і достатньо, щоб виконувалася умова (2).

Доведення. Доведення повністю аналогічне доведенню теореми 2 в роботі [4]. $\square$

Позначимо через L_b^T клас усіх T -періодичних функцій $f : \mathbb{R} \rightarrow D(A)$, для кожної з яких існують залежні від f сталі $K = K_f > 0, \alpha = \alpha_f \in (0, 1]$, з якими виконується умова (3).

Теорема 2. Нехай виконується умова (2), $y \in L_b^T, \alpha := \alpha_y \in \Omega_0$. Тоді існує єдиний розв'язок $x \in X$ рівняння (1). Крім того, існує $K_0 > 0$ таке, що для всіх $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ виконується нерівність

$$\|Tx(t_1) - Tx(t_2)\| \leq K_0 U(t_1 - t_2, \alpha).$$

Доведення. По теоремі Данфорда про відображення спектра [5] з умови (2) випливає, що $1 \notin \sigma(e^{-AT})$. Тому існує $A_0 := (e^{-AT} - I)^{-1}$.

З врахуванням результатів роботи [3] підстановкою можна переконатися, що T -періодичним розв'язком рівняння (1) є функція

$$x(t) = A_0 \int_t^{t+T} e^{A(t-s)} y(s) ds, t \in \mathbb{R}. \quad (6)$$

Доведемо єдиність розв'язку (6). Припустимо від супротивного, що існує ще один T -періодичний розв'язок z . Тоді різниця $x - z$ є розв'язком відповідного однорідного рівняння. В [3] показано, що в цьому разі на кожному відрізку $[t_0, t_1]$

$$x(t) - z(t) = e^{A(t-t_1)}(x(t_1) - z(t_1)), t \in [t_0, t_1].$$

Поклавши $t = t_0 = t_1 - T$ і врахувавши періодичність, отримаємо

$$x(t_1) - z(t_1) = e^{-AT}(x(t_1) - z(t_1)).$$

Оскільки $1 \notin \sigma(e^{-AT})$, то $x(t_1) - z(t_1) = 0, t_1 \in \mathbb{R}$.

Проведемо подальші міркування аналогічно доведенню леми 1.28 [6, с. 610]. Враховуючи лему 1, маємо

$$\begin{aligned} & \|Ae^{A(t-s)}(y(s) - y(t))\| \leq \\ & \leq K_y C_1 H(s - t)(s - t)^{\alpha-1} e^{-a(s-t)}, s > t, \end{aligned}$$

тому

$$Ax(t) = A_0 \int_t^{t+T} Ae^{A(t-s)}(y(s) - y(t))ds - y(t), \quad t \in \mathbb{R},$$

де інтеграл абсолютно збіжний, бо $\alpha \in \Omega_0$.

Нехай $t \in \mathbb{R}$, $h > 0$. Тоді маємо

$$A_0^{-1}(Ax(t) - Ax(t-h)) = w_0 + w_1 + w_2 + w_3 + w_4,$$

де

$$w_0 := A_0^{-1}(y(t-h) - y(t)),$$

$$w_1 := A \int_t^{t+T} (e^{A(t-s)} - e^{A(t-h-s)})(y(s) - y(t))ds,$$

$$w_2 := A \int_t^{t+T} e^{A(t-h-s)}(y(t-h) - y(t))ds,$$

$$w_3 := A \int_{t-h}^t e^{A(t-h-s)}(y(t-h) - y(s))ds,$$

$$w_4 := A \int_{t+T-h}^{t+T} e^{A(t-h-s)}(y(t-h) - y(s))ds.$$

Оцінимо отримані доданки, враховуючи леми 1, 2:

$$\|w_0\| \leq (1 + C_0)K_y h^\alpha \leq C_3^{-1}(1 + C_0)K_y U(h, \alpha);$$

$$\|w_1\| \leq L_2 K_y \int_t^{t+T} \frac{hH(s-t)}{(s-t+h)(s-t)}(s-t)^\alpha ds =$$

$$L_2 K_y h \int_0^T H(s)s^{\alpha-1} \frac{sh}{s+h} ds \leq L_2 K_y U(h, \alpha);$$

$$\|w_2\| \leq 2C_0 \cdot K_y h^\alpha \leq 2C_0 C_3^{-1} K_y U(h, \alpha);$$

$$\|w_3\| \leq L_1 \int_{t-h}^t \frac{H(t-s-h)}{(t-s-h)^{1-\alpha}} ds \leq L_1 U(h, \alpha),$$

$$\|w_4\| \leq L_1 \int_{t+T-h}^{t+T} \frac{H(t+T-s-h)}{(t+T-s-h)^{1-\alpha}} ds \leq L_1 U(h, \alpha).$$

Звідси отримуємо потрібну нерівність. $\square$

Наближення періодичного розв'язку.

Теорема 3. Нехай $f \in L_b^T$, $T = \frac{p}{q}$, $p, q \in \mathbb{N}$, p - парне. Припустимо, що виконується умова (2). Нехай $x \in X$ - єдиний розв'язок рівняння (1). Для всіх досить великих $N \in \mathbb{N}$ різницеве рівняння (4) при $\tau = (Nq)^{-1}$ має єдиний T -періодичний розв'язок $u(\tau)$ і

$$\sup_{n \in \mathbb{Z}} \|x(n\tau) - u_n(\tau)\| = \quad (7)$$

$$= O(\tau^{-1}U(\tau, \alpha)U(\tau, 1)), \quad \tau = (Nq)^{-1}, \quad N \rightarrow +\infty.$$

Доведення. Нехай $(Mx)_n := x_{n-1}$, $n \in \mathbb{Z}$, $x \in l_\infty(B)$. Покладемо при досить великих $N \in \mathbb{N}$

$$F_N := \frac{1}{p} \sum_{m=0}^{Np-1} M^m \sum_{k=0}^{Np-1} (z_k - z_k^{-1} - 2\tau A)^{-1} z_k^m,$$

де $z_k := e^{\frac{2\pi ki}{Np}}$, $k = \overline{0, Np-1}$ - корені з одиниці степеня Np .

Доведемо, що обернені оператори існують.

Позначимо $q_{kN} = \frac{z_k - z_k^{-1}}{2\tau} = iNq \sin \frac{2\pi k}{Np}$ та $R := \max\{|z| \mid z \in S_{a,\varphi} \cap i\mathbb{R}\}$. Розглянемо такі випадки:

1) $|q_{kN}| > R$. Тоді $q_{kN} \notin S_{a,\varphi}$.

2) $|q_{kN}| \leq R$, $0 \leq k \leq \frac{Np}{4}$. Тоді $|q_{kN}| \geq \frac{4qk}{p}$, звідки $k \leq \frac{TR}{4}$. Отже, маємо скінченну кількість значень k ; для них $q_{kN} \rightarrow \frac{2\pi ki}{T}$, $N \rightarrow \infty$.

3) $|q_{kN}| \leq R$, $\frac{Np}{4} < k \leq \frac{3Np}{4}$. Тоді $|q_{kN}| \geq \frac{2Nq}{\pi} \left| \frac{2\pi k}{Np} - \pi \right|$, звідки $\left| k - \frac{Np}{2} \right| \leq \frac{TR}{4}$. Отже, маємо скінченну кількість значень $k - \frac{Np}{2}$; для них $q_{kN} \rightarrow -\frac{2\pi i}{T} (k - \frac{Np}{2})$, $N \rightarrow \infty$ при $k - \frac{Np}{2} = \text{const}$.

4) $|q_{kN}| \leq R$, $\frac{3Np}{4} < k$. Тоді $|q_{kN}| \geq \frac{2Nq}{\pi} \left| \frac{2\pi k}{Np} - 2\pi \right|$, звідки $|k - Np| \leq \frac{TR}{4}$. Отже, маємо скінченну кількість значень $Np - k$; для них $q_{kN} \rightarrow \frac{2\pi i}{T} (Np - k)$, $N \rightarrow \infty$ при $Np - k = \text{const}$.

Таким чином, внаслідок умови (2) та парності p при досить великих N оператор $(z_k - z_k^{-1} - 2\tau A)^{-1}$ існує при всіх $k = \overline{0, Np-1}$.

Безпосередньо можна переконатися, що

$$F_N = (M^{-1} - M - 2\tau A)^{-1}.$$

Крім того, аналізуючи наведені вище випадки для q_{kN} та використовуючи означення 1,2 та ле-
му 2, маємо

$$\|F_N\| = O(N) +$$

$$+ O \left(N \sum_{k=TR/(2\pi)}^{Np/4} \|(z_k - z_k^{-1} - 2\tau A)^{-1}\| \right) =$$

$$= O(N) + O \left(N \sum_{k=TR/(2\pi)}^{Np/4} G(\sqrt{a^2 + |q_{kN}|^2}) \right) =$$

$$= O(N) + O \left(N \sum_{k=0}^{Np/4} G\left(\frac{4k}{T}\right) \right) =$$

$$= O \left(N \int_0^{Np/T} G(t) dt \right) = O \left(N^2 K_4 U \left(\frac{T}{Np}, 1 \right) \right) = \\ = O(\tau^{-2} U(\tau, 1)), \quad N \rightarrow +\infty.$$

Розглянемо послідовність

$$w_n = w_n(\tau) := u_n(\tau) - x(n\tau), \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Тоді, враховуючи (4), маємо

$$w_{n+1} - w_{n-1} = (x((n-1)\tau) - x((n+1)\tau)) + \\ + 2\tau(Aw_n + Ax(n\tau) + y(n\tau)) = 2\tau Aw_n + v_n, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Розглянемо це рівняння, як різницеве з відомою Np -періодичною послідовністю

$$v_n = v_n(\tau) = (x((n-1)\tau) - x((n+1)\tau)) + \\ + 2\tau(Ax(n\tau) + y(n\tau)), \quad n \in \mathbb{Z},$$

і невідомою Np -періодичною послідовністю $\{w_n, n \in \mathbb{Z}\}$. Тоді $w = (H^{-1} - H - 2\tau A)^{-1}v = F_N v$, звідки

$$\|w\|_\infty = O(\tau^{-2} U(\tau, 1)) \|v\|_\infty. \quad (8)$$

Враховуючи, що з (1) випливає, що

$$x((n+1)\tau) - x((n-1)\tau) = 2\tau A \int_{(n-1)\tau}^{(n+1)\tau} x(s) ds + \\ + 2\tau \int_{(n-1)\tau}^{(n+1)\tau} y(s) ds, \quad n \in \mathbb{Z},$$

маємо

$$v_n = 2\tau Ax(n\tau) - 2\tau A \int_{(n-1)\tau}^{(n+1)\tau} x(s) ds + 2\tau y(n\tau) - \\ - 2\tau \int_{(n-1)\tau}^{(n+1)\tau} y(s) ds, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Звідси

$$\|v\|_\infty \leq 2\tau \omega(Ax, \tau) + 2\tau \omega(y, \tau) = \\ = O(\tau U(\tau, \alpha)), \quad \tau \rightarrow 0, \quad (9)$$

де враховано гельдеровість функції y та теорему 2 (ω – модуль неперервності).

Враховуючи оцінки (8) і (9), отримаємо твердження теореми. $\square$

Наслідок. У випадку секторіального операторного коефіцієнта права частина оцінки (7) набуває вигляду

$$O(\tau^\alpha |\ln \tau|), \quad \tau = (Nq)^{-1}, \quad N \rightarrow +\infty,$$

при $\alpha \neq 1$ і

$$O(\tau \ln^2 \tau), \quad \tau = (Nq)^{-1}, \quad N \rightarrow +\infty,$$

при $\alpha = 1$.

Доведення. Дійсно, $G(t) = (t+1)^{-1}$, $t \geq 0$, отже $U(t, \alpha) = O(t^\alpha)$, $t \rightarrow 0$, при $\alpha \neq 1$, і $U(t, 1) = O(t |\ln t|)$, $t \rightarrow 0$. $\square$

Висновки.

Доведені умови існування та єдиності періодичного розв'язку лінійного диференціального рівняння першого порядку в банаховому просторі з G -секторіальним операторним коефіцієнтом. Показана можливість апроксимації цього розв'язку розв'язками відповідних різнице-вих рівнянь та оцінена точність апроксимації.

Список використаних джерел

1. Далецкий Ю.Л., Крейн М.Г. Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховом пространстве. М. 1970. – 536 с.
2. Городній М. Ф., Чайковський А. В. Про наближення обмеженого розв'язку диференціального рівняння з необмеженим операторним коефіцієнтом // Доповіді НАН України. – 2002. – № 6. – С. 10 – 14.
3. Городній М.Ф., Чайковский А.В. Об одном обобщении понятия секторального оператора // Мат. сборник. – 2006, №7, 197. – С.29-46.
4. Чайковський А.В. Узагальнення теореми Крейна для G -секторіальних операторів // Вісник Київського університету. Серія фіз.-мат. науки. – 2009, №3. – С.49-50.
5. Данфорд Н., Шварц Дж.Т. Линейные операторы. Общая теория. М., 2004. – 896 с.
6. Като Т. Теория возмущений линейных операторов. – М., 1972. – 740 с.

Надійшла до редколегії 26.04.2010

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 517.9

Андрій В. Анікушин*, аспірант

Узагальнена розв'язність лінійних інтегро-диференціальних рівнянь еліптичного типу

Доведено оцінки в негативних нормах для еліптичного інтегро-диференціального рівняння. Сформульовано теорему узагальненої розв'язності.

Ключові слова: еліптичне рівняння, інтегро-диференціальне рівняння, апіорні оцінки, узагальнена розв'язність.

*E-mail: anik_andrii@ukr.net

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусаїнов Д.Я.

1. Вступ

Інтегро-диференціальні рівняння, у яких оператор диференціювання присутній під знаком інтегралу, розглядалися ще на початку минулого століття. Зокрема, в роботах С. Л. Соболева [1,2] розглядалися рівняння типу

$$u(x,t) = f(x,t) + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n K_{\alpha_0, \dots, \alpha_n} D_{\alpha_0, \dots, \alpha_n} u(x,t) dx dt,$$

де

$$D_{\alpha_0, \dots, \alpha_n} = \frac{\partial^{\alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_n}}{\partial t^{\alpha_0} \partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}$$

диференціальні оператори, $K_{\alpha_0, \dots, \alpha_n}$ - деякі ядра, а $i = \alpha_0 + \alpha_1 + \dots + \alpha_n$.

У роботі [3] було розглянуто математичні моделі, що виникають в задачах теорії плазми і лінійної теорії спинових хвиль. Наприклад, електронно-іонні хвилі в холодній "замагніченій" плазмі, електронні хвилі в холодній плазмі у зовнішньому полі, спинові хвилі в однорідному фериті типу "легка вісь", спинові хвилі в двопіддратковому антиферромагнетикі, типу "легка площина", тощо. Ці моделі описуються інтегро-диференціальними рівняннями еліптичного типу. Відзначимо, що всі лінійні інтегро-диференціальні моделі наведені в [3] зводяться до одного з двох типів рівнянь:

Andrii V. Anikushyn, postgraduate student.

Generalized solvability of linear elliptic- like integro-differential equation

A priori estimations for linear elliptic integro-differential equation are proved. Theorem about existence and uniqueness of generalized solution is formulated.

Key Words: elliptic-like equation, integro-differential equation, a priori estimations, generalized solvability.

$$\Delta u(x,t) + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} K_i(t,\tau) u_i(x,\tau) d\tau = F(x,t), \quad (1)$$

або

$$\Delta u(x,t) - a^2 u(x,t) + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} K_i(t,\tau) u_i(x,\tau) d\tau = F(x,t), \quad (2)$$

де Δ - оператор Лапласа.

У цитованій роботі за допомогою спеціальних підстановок інтегро-диференціальні рівняння зводяться до крайових задач для диференціальних рівнянь в часткових похідних високих порядків. Але такий підхід спрацьовує завдяки тому, що ядра інтегральних операторів, що розглядаються, мають спеціальний вигляд. І для кожного конкретного рівняння потрібно шукати свою підстановку, що не завжди може призвести до успіху.

У цей же час теорія оснащених просторів та метод апіорних оцінок в негативних нормах дозволяє досліджувати лінійні інтегро-диференціальні рівняння безпосередньо.

Оцінки в негативних нормах вперше було отримано у 1950-х рр. при дослідженні еліптичних крайових задач [4] (див. також наведену там бібліографію). Оцінки у негативних нормах для широкого класу диференціальних операторів другого порядку разом з методикою їх побудови дещо пізніше з'явилися у роботах В.П. Діденка [5,6]. Згодом у роботах С.І. Ляшка та інших вчених оцінки в негативних нормах та теореми узагальненої розв'язності було одержано

для багатьох неklasичних рівнянь математичної фізики.

Дана робота присвячена дослідженню інтегро-диференціальних рівнянь еліптичного типу (1) та (2), в яких права частина $F(x, t)$ є елементом деякого негативного простору скінченного порядку, за допомогою нерівностей у негативних нормах.

2. Основні позначення

Розглянемо лінійний оператор, що узагальнює ліві частини деяких рівнянь з [3], які зазначені у вступі:

$$Lu = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x_i^2} + \int_0^t \sum_{i=1}^3 K_i(t, \tau) \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x_i^2} d\tau, \quad (3)$$

де $u(x, t)$ – функція, що описує стан системи в області $Q = \Omega \times (0, T)$, Ω – обмежена область в тривимірному просторі з гладкою межею $\partial\Omega$.

Разом з оператором L будемо розглядати спряжений оператор, що визначається наступним чином:

$$L^*u = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x_i^2} + \int_0^t \sum_{i=1}^3 K_i(\tau, t) \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x_i^2} d\tau. \quad (4)$$

Нехай $K_i(t, \tau)$ – інтегровані ядра. Будемо вважати, що вони обмежені, тобто існує така стала $M > 0$, що для довільних $t, \tau \in [0, T]$ виконується нерівність

$$|K_i(t, \tau)| < M.$$

Областю визначення операторів L, L^* вважасмо простір нескінченно диференційованих функцій, що задовольняють граничні умови

$$u|_{\partial\Omega} = 0. \quad (5)$$

Цей простір надалі будемо позначати через C_{BR}^∞ .

Через W_{BR}^+ позначимо поповнення простору гладких функцій, що задовольняють граничні умови (5) за нормою

$$\|u\|_{W_{BR}^+}^2 = \sum_{i=1}^3 \int_Q u_{x_i}^2(x, t) dQ.$$

Неважко переконатися, що простір W_{BR}^+ вкладається в $L_2(Q)$. Через W_{BR}^- позначимо негативний простір, побудований за W_{BR}^+ відносно $L_2(Q)$. Тобто на W_{BR}^- введено норму

$$\|f\|_{W_{BR}^-} = \sup_{u \in W_{BR}^+} \frac{(f, u)_{W_{BR}^- \times W_{BR}^+}}{\|u\|_{W_{BR}^+}},$$

де $(\cdot, \cdot)_{W_{BR}^- \times W_{BR}^+}$ – розширення білінійної форми $(\cdot, \cdot)_{L_2}$ з $W_{BR}^+ \times W_{BR}^+$ на $W_{BR}^- \times W_{BR}^+$ за неперервністю [7].

Відзначимо, що функції, з якими ми працюємо, задовольняють умовам теореми Фубіні. Тому в подальшому ми будемо змінювати порядок інтегрування, не посилаючись на це кожного разу.

3. Допоміжні твердження

Спочатку доведемо лему, якою будемо користуватися надалі.

Лема 1.

Нехай $F \in L_2[0, T]$ і для довільного числа $t \in [0, T]$ виконано нерівність $F(t) \geq 0$. Тоді для довільної сталої $c > 0$ має місце нерівність:

$$\int_0^t F(t) dt \int_0^t e^{ct} F(\tau) d\tau \leq \sqrt{\frac{T}{c}} \int_0^t e^{ct} F^2(\tau) d\tau.$$

Доведення. За нерівністю Коші-Буняковського маємо:

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{ct} F(\tau) d\tau &= \int_0^t e^{c\tau^2} \cdot e^{c(t-\tau^2)} F(\tau) d\tau \leq \\ &\leq \left(\int_0^t e^{c\tau} d\tau \cdot \int_0^t e^{c\tau} F^2(\tau) d\tau \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned} \int_0^t F(t) dt \int_0^t e^{ct} F(\tau) d\tau &\leq \\ &\leq \int_0^t F(t) \left(\int_0^t e^{c\tau} d\tau \int_0^t e^{c\tau} F^2(\tau) d\tau \right)^{\frac{1}{2}} dt \leq \\ &\leq \int_0^t F(t) \left(\int_0^t e^{c\tau} d\tau \int_0^t e^{c\tau} F^2(\tau) d\tau \right)^{\frac{1}{2}} dt = \\ &= \left(\int_0^t e^{c\tau} F^2(\tau) d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^t F(t) \sqrt{\frac{(e^t - 1)}{c}} dt. \end{aligned}$$

Знову скористаємося нерівністю Коші-Буняковського,

$$\int_0^t F(t) \frac{(e^t - 1)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{c}} dt = \int_0^t F(t) e^{ct} \frac{(e^t - 1)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{ce^{ct}}} dt \leq$$

$$\leq \left(\int_0^T F^2(t) e^{ct} dt \int_0^T \frac{(e^{ct} - 1)}{ce^{ct}} dt \right)^{\frac{1}{2}},$$

Отже,

$$\begin{aligned} & \left(\int_0^T e^{ct} F^2(\tau) d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^T F(t) \sqrt{\frac{(e^{ct} - 1)}{c}} dt \leq \\ & \leq \left(\int_0^T e^{ct} F^2(\tau) d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \times \\ & \times \left(\int_0^T F^2(t) e^{ct} dt \int_0^T \frac{(e^{ct} - 1)}{ce^{ct}} dt \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ & \leq \int_0^T e^{ct} F^2(\tau) d\tau \sqrt{\int_0^T \frac{1}{c} dt} = \sqrt{\frac{T}{c}} \int_0^T e^{ct} F^2(\tau) d\tau. \end{aligned}$$

□

4. Априорні нерівності

Лема 2.

Існує така стала $c_1 > 0$, що для довільної функції $u \in C_{BR}^\infty$ виконується нерівність:

$$c_1 \|u\|_{W_{BR}^*} \geq \|Lu\|_{W_{BR}^-}.$$

Доведення. Для будь-якої гладкої функції $v(x, t)$ маємо:

$$\begin{aligned} |(Lu, v)_{L_2(Q)}| & \leq \sum_{i=1}^3 \left| \int_Q u_{x_i x_i}(x, t) v(x, t) dQ \right| + \\ & + \sum_{i=1}^3 \left| \int_Q \int_0^T K_i(t, \tau) u_{x_i x_i}(x, \tau) d\tau v(x, t) dQ \right|. \end{aligned}$$

Проінтегруємо частинами.

$$\begin{aligned} |(Lu, v)_{L_2(Q)}| & \leq \sum_{i=1}^3 \int_Q |u_{x_i}(x, t) v_{x_i}(x, t)| dQ + \\ & + \sum_{i=1}^3 \int_Q \int_0^T |K_i(t, \tau)| |u_{x_i}(x, \tau)| |v_{x_i}(x, t)| d\tau dQ. \end{aligned}$$

Застосуємо декілька разів нерівність Коші-Буняковського

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_Q |u_{x_i}(x, \tau)| |v_{x_i}(x, t)| d\tau dt \leq \\ & \leq \int_0^T \int_Q |u_{x_i}(x, \tau)|^2 d\tau |v_{x_i}(x, t)|^2 dt \leq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \leq \int_0^T \left(\int_0^T d\tau \int_Q u_{x_i}^2(x, \tau) dQ \right)^{\frac{1}{2}} |v_{x_i}(x, t)| dt \leq \\ & \leq \left(\int_0^T T \int_Q u_{x_i}^2(x, \tau) d\tau dt \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dt \right)^{\frac{1}{2}} = \\ & \leq T \left(\int_Q u_{x_i}^2(x, \tau) dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Використавши обмеженість ядер, нерівність Коші-Буняковського та попередні міркування, маємо:

$$\begin{aligned} |(Lu, v)_{L_2(Q)}| & \leq \\ & \leq \sum_{i=1}^3 \left(\int_Q u_{x_i}^2(x, t) dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}} + \\ & + MT \sum_{i=1}^3 \int_Q \int_0^T |u_{x_i}(x, \tau)| |v_{x_i}(x, t)| d\tau dQ \leq \\ & \leq \sum_{i=1}^3 \left(\int_Q u_{x_i}^2(x, t) dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}} + \\ & + MT \sum_{i=1}^3 \int_Q \left(\int_0^T u_{x_i}^2(x, \tau) d\tau \int_0^T v_{x_i}^2(x, t) dt \right)^{\frac{1}{2}} dQ \leq \\ & \leq \sum_{i=1}^3 \left(\left(\int_Q u_{x_i}^2(x, t) dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}} + \right. \\ & \left. + MT \left(\int_Q \int_0^T u_{x_i}^2(x, t) dt dQ \int_Q \int_0^T v_{x_i}^2(x, t) dt dQ \right)^{\frac{1}{2}} \right) = \\ & = (1 + MT) \sum_{i=1}^3 \left(\int_Q u_{x_i}^2(x, t) dQ \int_Q v_{x_i}^2(x, t) dQ \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Отже,

$$\begin{aligned} |(Lu, v)_{L_2(Q)}| & \leq (1 + MT) \|u\|_{W_{BR}^*} \|v\|_{W_{BR}^-} = \\ & = c_1 \|u\|_{W_{BR}^*} \|v\|_{W_{BR}^-}. \end{aligned}$$

Поділимо обидві частини на $\|v\|_{W_{BR}^-}$ та перейдемо до супремуму по v . Маємо:

$$\sup_{v \in C_{BR}^\infty} \frac{|(Lu, v)_{L_2(Q)}|}{\|v\|_{W_{BR}^-}} \leq c_1 \|u\|_{W_{BR}^*}.$$

Зауважимо, що множина гладких функцій є

щільною в W_{BR}^* , а отже,

$$\sup_{u \in W_{BR}^*} \frac{|(Lu, v)_{L_2(Q)}|}{\|v\|_{W_{BR}^*}} = \sup_{u \in C_{2n}^\infty} \frac{|(Lu, v)_{L_2(Q)}|}{\|v\|_{W_{BR}^*}} \leq c_1 \|u\|_{W_{BR}^*}.$$

□

Лема 3.

Існує така стала $c_1 > 0$, що для довільної функції $u \in C_{BR}^\infty$ виконується нерівність:

$$c_1 \|u\|_{W_{BR}^*} \geq \|L^*u\|_{W_{BR}^*}.$$

Доведення. Аналогічно доведенню лема (2).

□

З а у в а ж е н н я 1. Доведені нерівності дозволяють продовжити оператори L та L^* з множини C_{BR}^∞ на весь простір W_{BR}^* за неперервністю. Збережемо за розширенням оператора те саме позначення L . Відзначимо, що нерівності, вказані в лемах (2) і (3), будуть справедливими вже для всіх функцій $u \in W_{BR}^*$.

Лема 4.

Існує така стала $c_0 > 0$, що для довільної функції $u \in W_{BR}^*$ виконується нерівність:

$$\|Lu\|_{W_{BR}^*} \geq c_0 \|u\|_{W_{BR}^*}. \quad (6)$$

Доведення. Нехай спочатку $u \in C_{BR}^\infty$, а

$$v(x, t) = -e^{-ct} u(x, t). \quad (7)$$

Тоді $u(x, t) = -e^{ct} v(x, t)$. Отже,

$$\begin{aligned} (Lu, v)_{L_2(Q)} &= \int_Q \sum_{i=1}^3 u_{x_i}(x, t) v(x, t) dQ + \\ &+ \int_Q \int_0^T \sum_{i=1}^3 K_i(t, \tau) u_{x_i}(x, \tau) d\tau v(x, t) dQ = \\ &= - \int_Q \sum_{i=1}^3 e^{ct} v_{x_i}(x, t) v(x, t) dQ - \\ &- \int_Q \int_0^T \sum_{i=1}^3 K_i(t, \tau) e^{ct} v_{x_i}(x, \tau) d\tau v(x, t) dQ. \end{aligned}$$

Проінтегруємо частинами.

$$(Lu, v)_{L_2(Q)} = \int_Q \sum_{i=1}^3 e^{ct} v_{x_i}(x, t) v_{x_i}(x, t) dQ +$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{i=1}^3 \int_Q \int_0^T K_i(t, \tau) e^{ct} v_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dQ = \\ &= \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{i=1}^3 \int_Q \int_0^T K_i(t, \tau) e^{ct} v_{x_i}(x, \tau) d\tau v_{x_i}(x, t) dQ = \\ &\geq \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ - \end{aligned}$$

$$- \sum_{i=1}^3 \int_Q \int_0^T e^{ct} |K_i(t, \tau)| \cdot |v_{x_i}(x, \tau) v_{x_i}(x, t)| d\tau dQ.$$

Оцінимо кожний доданок в останній сумі.

$$\begin{aligned} &\int_Q \int_0^T e^{ct} |K_i(t, \tau)| \cdot |v_{x_i}(x, \tau) v_{x_i}(x, t)| d\tau dQ \leq \\ &\leq M \int_Q \int_0^T e^{ct} |v_{x_i}(x, \tau) v_{x_i}(x, t)| d\tau dQ = \\ &= M \int_\Omega \int_0^T \int_0^T e^{ct} |v_{x_i}(x, \tau) v_{x_i}(x, t)| d\tau dt d\Omega. \end{aligned}$$

Тепер застосуємо лему (1)

$$\begin{aligned} &\int_0^T \int_0^T e^{ct} |v_{x_i}(x, \tau) v_{x_i}(x, t)| d\tau dt \leq \\ &\leq \sqrt{\frac{T}{c}} \int_0^T e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dt. \end{aligned}$$

Отже, маємо:

$$\begin{aligned} &\int_\Omega \int_0^T \int_0^T e^{ct} |K(t, \tau) v_{x_i}(x, \tau) v_{x_i}(x, t)| d\tau dt d\Omega \leq \\ &\leq M \int_\Omega \sqrt{\frac{T}{c}} \int_0^T e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dt d\Omega = \\ &= M \sqrt{\frac{T}{c}} \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ. \end{aligned}$$

Загалом

$$\begin{aligned} (Lu, v)_{L_2(Q)} &\geq \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ - \\ &- \sum_{i=1}^3 M \sqrt{\frac{T}{c}} \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ. \end{aligned}$$

Обираючи $c = 4TM^2$, маємо:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ - \\ & - \sum_{i=1}^3 M \sqrt{\frac{T}{c}} \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ \geq \\ & \geq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ. \end{aligned}$$

Отже,

$$(Lu, v)_{L_2(Q)} \geq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ \geq \frac{1}{2} \|v\|_{W_{BR}^+}^2.$$

Як відомо [7], для розширення білінійної форми $(\cdot, \cdot)_{W_{BR}^- \times W_{BR}^+}$ справедлива нерівність

$$(u, v)_{W_{BR}^- \times W_{BR}^+} \leq \|u\|_{W_{BR}^-} \|v\|_{W_{BR}^+}.$$

Тому

$$\|Lu\|_{W_{BR}^-} \|v\|_{W_{BR}^+} \geq (Lu, v)_{L_2(Q)} \geq \frac{1}{2} \|v\|_{W_{BR}^+}^2.$$

Поділивши ліву та праву частини нерівності на $\|v\|_{W_{BR}^+}$, отримаємо:

$$\|Lu\|_{W_{BR}^-} \geq \frac{1}{2} \|v\|_{W_{BR}^+}.$$

Залишилося зауважити, що

$$\begin{aligned} \|v\|_{W_{BR}^+}^2 &= \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ = \\ &= \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{-ct} u_{x_i}^2(x, t) dQ \geq \\ &\geq e^{-cT} \sum_{i=1}^3 \int_Q u_{x_i}^2(x, t) dQ \geq 4c_0^2 \|u\|_{W_{BR}^+}^2, \end{aligned}$$

для деякої сталої c_0 . Справедливість нерівності (6) для всіх $u \in W_{BR}^+$ отримуємо граничним переходом. $\square$

Лема 5.

Існує така стала $c_0 > 0$, що для довільної функції $u \in W_{BR}^+$ виконується нерівність:

$$\|L^*u\|_{W_{BR}^-} \geq c_0 \|u\|_{W_{BR}^+}.$$

Доведення. Аналогічно доведенню леми (4). $\square$

З а у в а ж е н н я 2. Для оператора

$$\begin{aligned} (L - a^2 E)u &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x_i^2} - a^2 u(x, t) + \\ &+ \int_0^3 \sum_{i=1}^3 K_i(t, \tau) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x_i^2} d\tau, \end{aligned} \quad (8)$$

де E – одиничний оператор, справедливі аналогічні твердження до лем (2)–(5).

Доведення. При доведенні оцінки зверху варто лише зауважити, що внаслідок нерівності Коші-Буняковського

$$|(-a^2 u, v)_{L_2(Q)}| \leq a^2 \|u\|_{L_2} \cdot \|v\|_{L_2},$$

а внаслідок нерівності Фрідрігса

$$\|u\|_{L_2(Q)} \leq c \|u\|_{W_{BR}^+},$$

Отже, загалом маємо:

$$|(-a^2 u, v)_{L_2(Q)}| \leq c_0 \|u\|_{W_{BR}^+} \cdot \|v\|_{W_{BR}^+}.$$

Решта впливає з леми (2). Доведемо оцінку знизу. Нехай

$$v(x, t) = -e^{-ct} u(x, t).$$

Тоді

$$((L - a^2 E)u, v)_{L_2(Q)} = (Lu, v)_{L_2(Q)} - a^2 (u, v)_{L_2(Q)}.$$

Згідно леми (4) маємо, що при деякому c

$$\begin{aligned} (Lu, v)_{L_2(Q)} &\geq \sum_{i=1}^3 \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ - \\ &- \sum_{i=1}^3 M \sqrt{\frac{T}{c}} \int_Q e^{ct} v_{x_i}^2(x, t) dQ \geq \frac{1}{2} \|v\|_{W_{BR}^+}^2 \end{aligned}$$

Доданок, що лишився, має вигляд:

$$\begin{aligned} -a^2 (u, v)_{L_2(Q)} &= -a^2 \int_Q -e^{-ct} v^2(x, t) dQ = \\ &= a^2 \int_Q e^{-ct} v^2(x, t) dQ \geq 0. \end{aligned}$$

Тому

$$((L - a^2 E)u, v)_{L_2(Q)} \geq c_0 \|v\|_{W_{BR}^+}^2.$$

Решта аналогічно доведенню лемми (4).

5. Узагальнена розв'язність

Розглянемо задачу

$$Lu = F, F \in W_{BR}^{-} \quad (9)$$

Її розв'язки будемо розуміти в наступному сенсі:
Означення 1. Розв'язком задачі (9) з правою частиною $F \in W_{BR}^{-}$ називається функція $u(x, t) \in W_{BR}^{+}$, для якої існує послідовність функцій $u_i(x, t) \in C_{BR}^{\infty}$ така, що

$$\|u - u_i\|_{W_{BR}^{+}} \rightarrow 0, \quad \|Lu_i - F\|_{W_{BR}^{-}} \rightarrow 0, i \rightarrow \infty.$$

Означення 2. Сильним розв'язком задачі (9) з правою частиною $F \in W_{BR}^{-}$ називається така функція $u(x, t) \in W_{BR}^{+}$, що

$$Lu - F = 0$$

у просторі W_{BR}^{-} .

Означення 3. Слабким розв'язком задачі (9) з правою частиною $F \in W_{BR}^{-}$ називається функція $u(x, t) \in W_{BR}^{+}$ така, що рівність

$$(Lu, v)_{W_{BR}^{+}} = (F, v)_{W_{BR}^{-}}$$

виконується для довільних функцій $v \in W_{BR}^{+}$.

Аналогічно визначаються розв'язки спряженої задачі

$$L^*u = F, F \in W_{BR}^{-} \quad (10)$$

У попередньому пункті для операторів L та L^* доведено нерівності

$$\begin{cases} c^{-1} \|u\|_{W_{BR}^{+}} \leq \|Lu\|_{W_{BR}^{-}} \leq c \|u\|_{W_{BR}^{+}} \\ c^{-1} \|v\|_{W_{BR}^{-}} \leq \|L^*v\|_{W_{BR}^{+}} \leq c \|v\|_{W_{BR}^{-}} \end{cases} \quad (11)$$

Спираючись на ці оцінки та на результати роботи [8], сформулюємо теореми узагальної розв'язності.

Теорема 1. Означення (1),(2),(3) еквівалентні.

Теорема 2. Для довільного елемента $F \in W_{BR}^{-}$ існує єдиний розв'язок задачі (9) в сенсі означень (1)-(3).

Теорема 3. Нехай $u(x, t)$ – розв'язок задачі (9) з правою частиною $F \in W_{BR}^{-}$ в сенсі означень

(1),(2),(3). Тоді має місце оцінка

$$\|u\|_{W_{BR}^{+}} \leq c \|F\|_{W_{BR}^{-}},$$

де стала c не залежить від F .

З а у в а ж е н н я 3. Аналогічні теореми можна сформулювати і для спряженої задачі (10).

З а у в а ж е н н я 4. Аналогічні означення узагальнених розв'язків та теореми справедливі для оператора $L - a^2 E$.

Список використаних джерел

- [1] Соболев С.Л. Об одном классе интегро-дифференциальных уравнений со многими независимыми переменными. I. / С.Л. Соболев // ДАН СССР. – Том XVII. – №9. – 1937. – С. 447–450.
- [2] Соболев С.Л. Об одном классе интегро-дифференциальных уравнений со многими независимыми переменными. II. / С.Л. Соболев // ДАН СССР. – Том XVIII. – №2. – 1938. – С. 75–79.
- [3] Свешников А.Г. Линейные и нелинейные уравнения соболевского типа / А.Г. Свешников, А.Б. Альшин, М.О. Корпусов, Ю.Д. Плетнер. – М.: Физматлит, 2007. – 734 с.
- [4] Березанский Ю. М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов / Березанский Ю. М. – К.: Наукова думка, 1965. – 789 с.
- [5] Диденко В.П. О краевых задачах для многомерных гиперболических уравнений с вырождением / В.П. Диденко // ДАН СССР. – 1972. – Т. 205. – № 4. – С. 763-766.
- [6] Диденко В.П. Краевые задачи для вырождающихся уравнений и уравнений смешанного типа: автореф. дисс. ... докт. физ.-мат. наук / В.П. Диденко. – Киев, 1974.
- [7] Березанский Ю. М. Функциональный анализ / Ю. М. Березанский, Г.Ф. Ус, З.Г. Шефтель. – К.: Вища школа, 1990. – 600 с.
- [8] Ляшко С.И. Обобщенное управление линейными системами / С.И. Ляшко – К.: Наукова думка, 1998. – 465 с.

Надійшла до редакції 25.09.2010

УДК 537.6

Горобець О.Ю., д-р фіз.-мат. наук, професор
Потьомкін^{*} М.М., аспірант

Моделювання обертального руху мікрочастинки під дією зовнішнього осцилюючого магнітного поля

В статті запропоновано модель обертального руху ферромагнітної мікрочастинки у швидко осцилюючому магнітному полі, яка дозволяє оцінити її обертальний рух у магнітній пастці і локалізувати її в умовах потоку рідини. Наведені приклади розрахунків.

Ключові слова: магнітна пастка, ферромагнітна мікрочастинка, швидко осцилююче магнітне поле.

O.Yu. Gorobets, professor doctor of physico-mathematical sciences,
M.M. Potyemkin, post-graduate student

Modelling of a microparticle rotational movement under the influence of an external oscillating magnetic field

The model of a ferromagnetic microparticle rotational movement in rapidly oscillating magnetic field which allows to estimate ferromagnetic microparticle rotational movement in a magnetic trap and to localise it in the conditions of a stream of a liquid is offered. Examples of calculations are shown.

Key words: magnetic trap, ferromagnetic microparticle, rapidly oscillating magnetic field

^{*}E-mail: mike_potyemkin@mail.ru.

Статтю представив д-р фіз.-мат. наук, професор Анісімов А.В.

На сьогодні в багатьох галузях науки широко використовуються методи маніпулювання мікрооб'єктами за допомогою фізичних полів [1, 2]. Зокрема, в клінічних дослідженнях вони дозволяють вирішувати задачі дослідження взаємодії клітин, вивчати реакцію окремих клітин на зовнішні подразники, виробовувати новітні лікувальні препарати на клітинному рівні [3].

Одним з перспективних методів таких досліджень є локалізація мікрочасток за допомогою магнітної пастки. Його особливістю, в порівнянні з іншими техніками, є можливість маніпулювання окремими частинками, дослідження фізичних та біологічних властивостей клітини в природному середовищі [4, 5], вивчення механічних та адсорбційних властивостей ДНК [6, 7] тощо.

Однак, з метою забезпечення умов, прийнятних для живих клітин, такі дослідження зазвичай здійснюються у проточній рідині [8], що потребує врахування під час використання та проектування магнітних пасток додаткової сили, зумовленою наявним гідравлічним потоком. Тому розробка нових та удосконалення існуючих методик дослідження магнітних пасток з урахуванням впливу сукупності сил, які діють на мікрочастку, є актуальним науковим завданням.

Необхідно зазначити, що для локалізації руху мікрочастинки, яка знаходиться під дією магнітного поля, повинна виконуватися умова існування точки, де потенціальна енергія досягає

свого локального мінімуму, тобто утворюється потенціальна яма [9]. Оскільки в постійному магнітному полі для феро- та парамагнітних мікрочастинок досягнути такого локального мінімуму неможливо [9], в [10] було запропоновано використати змінне магнітне поле аналогічно методу, який запропонував Капіца [11] для стабілізації верхнього нестійкого положення математичного маятника. Це надає змогу, створивши ефективний локальний мінімум енергії, захоплювати мікрочастинку та допомогою змінного осцилюючого магнітного поля.

У статті [10] було розглянуто поступальний рух мікрочастинки під дією швидко осцилюючого магнітного поля. Однак дія магнітного поля викликає і обертальний рух мікрочастинки, який також повинен бути врахований під час моделювання її локалізації у магнітній пастці. Проведення досліджень обертального руху мікрочастинки для таких умов потребує розроблення відповідної моделі, що і є метою цієї статті.

Під час моделювання обертального руху мікрочастинки використовується система кутів Ейлера [12], які пов'язують нормальну земну систему координат (Ox_z, Y_z, Z_z) та зв'язану систему координат ($OXYZ$) (табл. 1 [12]). Нормальна земна система координат має незмінну орієнтацію відносно Землі. Початок координат співпадає з центром мас мікрочастинки. Вісі Ox_z та OZ_z лежать в горизонтальній площині. Їх

орієнтація може бути прийнята довільно залежно від мети дослідження. Для аналізу поведінки мікрочастинки вісь OX_z спрямована горизонтально праворуч. У будь-якому випадку вісь OY_z спрямована вгору, а вісь OZ_z лежить в горизонтальній площині і утворює разом з осями OX_z і OY_z праву систему осей координат. У зв'язаній системі координат початок координат розташований в центрі мас мікрочастинки, а вісі системи напрямлені в довільному напрямі. Послідовно обертаючи зв'язану систему координат на кожен з кутів Ейлера, отримаємо відповідне кутове положення зв'язаної системи відносно нормальної системи координат [12].

Зв'язок між кутами Ейлера та кутовими швидкостями обертання зв'язаних осей задається системою рівнянь [12]

де $\vec{m}$ - магнітний момент мікрочастинки $\vec{m} = (m, 0, 0)$, $\vec{H}_0$ - зовнішнє магнітне поле $\vec{H}_0 = (0, H_0, 0)$, $\chi \vec{\omega}$ - момент сил тертя, χ - коефіцієнт тертя мікрочастинки. Зовнішнє магнітне поле при цьому змінюється за законом

$$H_0 = \tilde{H}_0 \sin \Omega t \quad (4)$$

де Ω - частота коливання зовнішнього магнітного поля, $\tilde{H}_0$ - амплітуда коливання зовнішнього магнітного поля.

Зовнішнє магнітне поле в проекціях на вісі зв'язаної системи координат описується системою рівнянь

$$\begin{cases} H_{0x} = H_0 \sin \theta, \\ H_{0y} = H_0 \cos \theta \cos \gamma, \\ H_{0z} = -H_0 \cos \theta \sin \gamma, \end{cases}$$

[таблиця]

Зв'язана система	Нормальна земна система		
	OX_z	OY_z	OZ_z
OX	$\cos \psi \cos \theta$	$\sin \theta$	$-\sin \psi \cos \theta$
OY	$-\cos \psi \sin \theta \cos \gamma + \sin \psi \sin \gamma$	$\cos \theta \cos \gamma$	$\cos \psi \sin \gamma + \sin \psi \sin \theta \cos \gamma$
OZ	$\cos \psi \sin \theta \sin \gamma + \sin \psi \cos \gamma$	$-\cos \theta \sin \gamma$	$\cos \psi \cos \gamma - \sin \psi \sin \theta \sin \gamma$

$$\begin{cases} \dot{\omega}_x = \dot{\gamma} + \dot{\psi} \sin \theta, \\ \dot{\omega}_y = \dot{\psi} \cos \theta \cos \gamma + \dot{\theta} \sin \gamma, \\ \dot{\omega}_z = \dot{\theta} \cos \gamma - \dot{\psi} \cos \theta \sin \gamma, \end{cases} \quad (1)$$

де ψ, γ, θ - кути Ейлера, $\dot{\psi}, \dot{\gamma}, \dot{\theta}$ - кутові швидкості.

Рівняння обертального руху мікрочастинки відносно центра мас має вигляд [12]

$$\frac{d\vec{L}}{dt} + [\vec{\omega} \times \vec{L}] = \vec{M}_R, \quad (2)$$

де $\vec{L}$ - момент кількості руху мікрочастинки, $\vec{M}_R$ - головний момент зовнішніх сил, які діють на мікрочастинку, $\vec{\omega}$ - кутова швидкість обертання.

Головний момент зовнішніх сил $\vec{M}_R$ визначається як [5]:

$$\vec{M}_R = [\vec{m} \times \vec{H}_0] - \chi \vec{\omega}, \quad (3)$$

а проекції вектора моменту кількості руху $\vec{L}$ із (2) на рухливі вісі в загальному випадку записуються в такому вигляді [12]:

$$\begin{cases} L_x = I_x \omega_x - I_{xy} \omega_y - I_{xz} \omega_z, \\ L_y = -I_{xy} \omega_x + I_y \omega_y - I_{yz} \omega_z, \\ L_z = -I_{xz} \omega_x - I_{yz} \omega_y + I_z \omega_z. \end{cases} \quad (5)$$

Із (3), використовуючи співвідношення (5) та враховуючи симетрію сферичної мікрочастинки, тобто $I_x = I_y = I_z = I$ і $I_{xy} = 0$, отримаємо систему рівнянь її руху відносно центра мас

$$\begin{cases} I \frac{d\omega_x}{dt} = M_{Rx}, \\ I \frac{d\omega_y}{dt} = M_{Ry}, \\ I \frac{d\omega_z}{dt} = M_{Rz}. \end{cases} \quad (6)$$

Проекції головного моменту зовнішніх сил, які діють на мікрочастинку, можна отримати з (3)

$$\begin{cases} M_{P_x} = -\chi\omega_x, \\ M_{P_y} = mH_0 \cos\theta \sin\gamma - \chi\omega_y, \\ M_{P_z} = mH_0 \cos\theta \cos\gamma - \chi\omega_z \end{cases} \quad (7)$$

Тоді, визначивши $\frac{d\omega_x}{dt}, \frac{d\omega_y}{dt}, \frac{d\omega_z}{dt}$ з (1),

отримаємо

$$\begin{cases} \frac{d\omega_x}{dt} = \ddot{\gamma} + \ddot{\psi} \sin\theta + \dot{\psi} \cos\theta, \\ \frac{d\omega_y}{dt} = \ddot{\psi} \cos\theta \cos\gamma - \ddot{\psi} \sin\theta \cos\gamma - \dot{\psi} \cos\theta \sin\gamma + \ddot{\theta} \sin\gamma + \dot{\theta} \cos\gamma, \\ \frac{d\omega_z}{dt} = \ddot{\theta} \cos\gamma - \dot{\theta} \sin\gamma - \dot{\psi} \cos\theta \sin\gamma + \dot{\psi} \sin\theta \sin\gamma - \dot{\psi} \cos\theta \cos\gamma, \end{cases} \quad (8)$$

а підставивши (7) та (8) в (6), отримаємо систему диференціальних рівнянь, яка описує обертальний рух мікрочастинки

$$\begin{cases} I(\ddot{\gamma} + \ddot{\psi} \sin\theta + \dot{\psi} \cos\theta) = -\chi(\dot{\gamma} + \dot{\psi} \sin\theta), \\ I(\ddot{\psi} \cos\theta \cos\gamma - \ddot{\psi} \sin\theta \cos\gamma - \dot{\psi} \cos\theta \sin\gamma + \ddot{\theta} \sin\gamma + \dot{\theta} \cos\gamma) = \\ = m\tilde{H}_0 \sin\omega t \cos\theta \sin\gamma - \chi(\dot{\psi} \cos\theta \cos\gamma + \dot{\theta} \sin\gamma), \\ I(\ddot{\theta} \cos\gamma - \dot{\theta} \sin\gamma - \dot{\psi} \cos\theta \sin\gamma + \dot{\psi} \sin\theta \sin\gamma - \dot{\psi} \cos\theta \cos\gamma) = \\ = m\tilde{H}_0 \sin\omega t \cos\theta \cos\gamma - \chi(\dot{\theta} \cos\gamma - \dot{\psi} \cos\theta \sin\gamma) \end{cases}$$

Після заміни $\frac{\chi}{I} = A$, $\frac{m\tilde{H}_0}{I} = B$ та відповідних перетворень отримаємо спрощену систему обертального руху мікрочастинки під дією зовнішнього магнітного поля (4)

$$\begin{cases} \ddot{\gamma} = -A\dot{\gamma} - \ddot{\psi} \cos\theta - \dot{\psi} \sin\theta \operatorname{tg}\theta - \dot{\theta} \operatorname{tg}\theta, \\ \ddot{\theta} = B \sin\omega t \cos\theta - A\dot{\theta} + \ddot{\psi} \cos\theta, \\ \ddot{\psi} = (\dot{\psi} \sin\theta - \dot{\theta})/\cos\theta - A\dot{\psi}, \end{cases} \quad (9)$$

яка може бути розв'язана відомими чисельними методами.

Аналіз системи (9) свідчить, що фактично характер руху мікрочастинки буде визначатись співвідношеннями між коефіцієнтами A та B , перший з яких (A) відбиває вплив на обертальний рух сили тертя, а другий (B) – вплив зовнішнього магнітного поля.

Тому для якісного дослідження руху мікрочастинки був проведений комплекс розрахунків для частоти магнітного поля 100 Гц. При цьому розглядались три характерні випадки. В першому випадку система характеризувалась великим тертям, у другому – малим тертям, а в третьому – вплив тертя та зовнішнього

магнітного поля були сумірні.

Як і очікувалось, у разі дуже сильного тертя мікрочастинка була практично нерухомою, тобто її обертальний рух був відсутній.

У разі сумірного впливу тертя та зовнішнього магнітного поля (рис. 1) мікрочастинка здійснювала постійний коливальний рух навколо осі, вздовж якої був спрямований вплив зовнішнього магнітного поля, а відносно двох інших осей вона займала деяке стає положення після досить короткого перехідного процесу.

Найбільш цікавий характер руху мікрочастинки в разі малого тертя (рис. 2). У цьому разі обертальний рух має дві характерні ділянки. На першій ділянці, яка являє собою перехідний процес, мікрочастинка здійснювала коливання навколо осі, вздовж якої був спрямований вплив зовнішнього магнітного поля, а навколо інших осей вона оберталась. Причому період такого обертання мав деяку залежність від кута повороту навколо осі, вздовж якої був спрямований вплив зовнішнього магнітного поля. Можна сказати, що на цій ділянці відбувалося розкачування мікрочастинки.

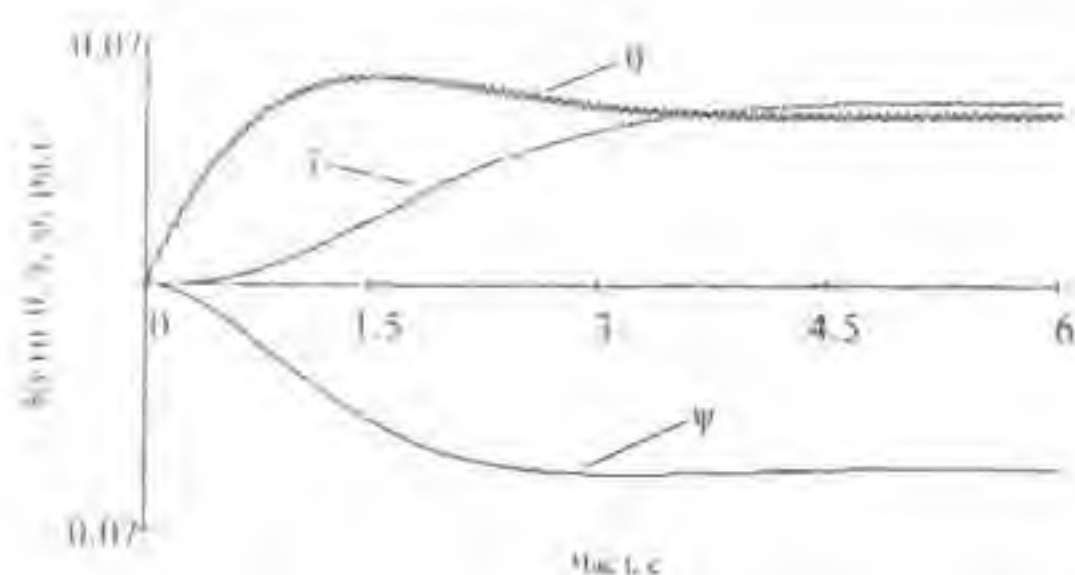


Рис. 1 Характер обертового руху мікрочастинки у разі сумірного впливу тертя та зовнішнього магнітного поля

Після достатнього розкачування почалася друга характерна ділянка обертового руху, на якій мікрочастинка перейшла в режим обертання навколо усіх осей.

Результати проведених досліджень показують, що використання розробленої моделі дозволяє здійснювати моделювання обертового руху мікрочастинки під дією зовнішнього осцилюючого магнітного поля.

Водночас необхідно зазначити, що тут була розглянута найпростіша модель обертового руху, яка передбачала сферичну форму мікрочастинки. Однак на практиці забезпечити сферичну форму мікрочастинки досить складно, і

найчастіше вона має форму, близьку до еліпсоїдальної. У такому разі обертовий рух може суттєво впливати і на її поступальний рух та на умови локалізації мікрочастинки в магнітній пастці.

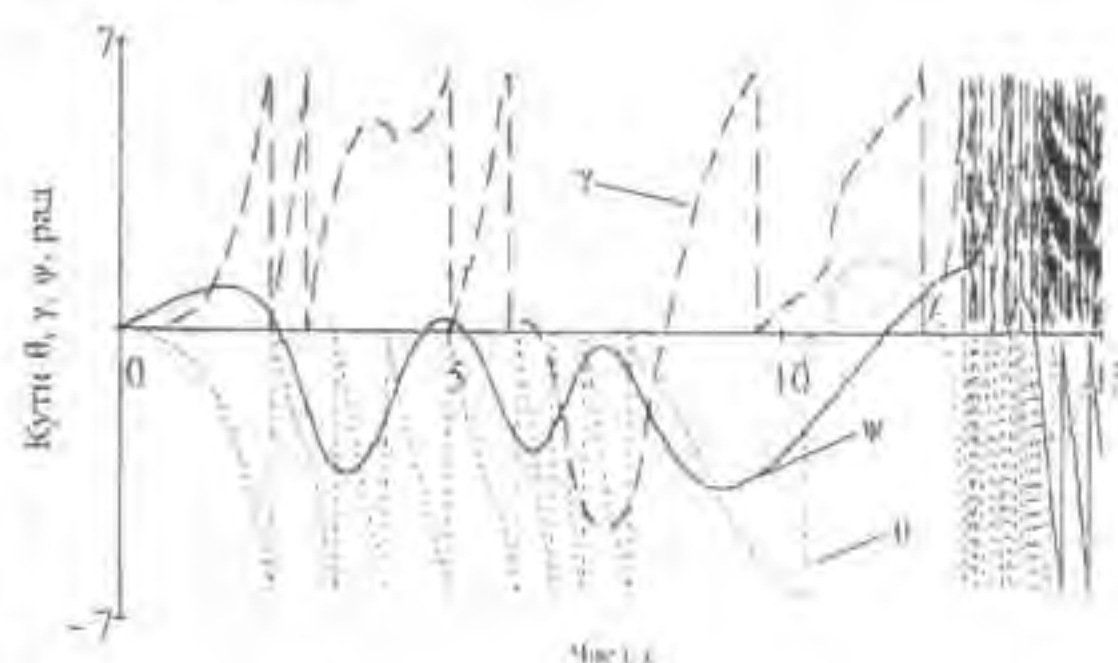


Рис. 2 Характер обертового руху мікрочастинки у разі малого тертя

Тому об'єднання розглянутої моделі обертового руху мікрочастинки з моделлю її поступального руху [10] з додатковим урахуванням еліпсоїдальної форми надасть можливість досліджувати складний просторовий рух мікрочастинки під дією зовнішнього швидко осцилюючого магнітного поля, що і є подальшим напрямком проведення досліджень.

DNA micromanipulation // *Rev. Sci. Instrum.* 2000. Vol. 71. Pp. 4561–4570.

1. Каррерас Б.А., Ньюман Д., Линч В.Е., Даймонд П.Х. Самоорганизованная критичность как парадигма для процессов переноса в плазме, удерживаемой магнитным полем // *Физика плазмы*. 1996. Т. 22. № 9. С. 819–833.
2. Капоуцек Б.Б., Кадоуцек М.Б. Конденсаты Бозе-Ейнштейна // *Успехи физических наук*. 1996. Т. 167. № 6. С. 649.
3. Goya G.F., Grazzi V. Magnetic Nanoparticles for Cancer Therapy // *Current Nanoscience*. 2008. Vol. 4. Pp. 1–16.
4. Hasu B.G., Jakab K., Banki P., Toth F.I., Forgacs G. Magnetic tweezers for intracellular applications // *Rev. Sci. Instrum.* 2003. Vol. 74. Pp. 4158–4163.
5. A.H.B. de Vries, Kreim B.E. Micro magnetic tweezers for nanomanipulation inside living cells // *Biophys. J.* 2005. Vol. 88. Pp. 2137–2144.
6. Zlatanova J., Leuba S.H. Magnetic tweezers: a sensitive tool to study DNA and chromatin at the single-molecule level // *Biochem. Cell Biol.* 2003. Vol. 81. Pp. 151–159.
7. Huber C., Wirtz D. Magnetic tweezers for DNA micromanipulation // *Rev. Sci. Instrum.* 2000. Vol. 71. Pp. 4561–4570.
8. Lee C.S., Lee H., Westervelt R.M. Microelectromagnets for the control of magnetic nanoparticles // *Applied physics letters*. 2001. Vol. 79. № 20 Pp.
9. Филипп У.Д. Лазерное охлаждение и пленение нейтральных атомов // *Успехи физических наук*. 1999. Т. 169. № 3. С. 305–322.
10. Горобець О.Ю., Потьомкин М.М. Локалізація феромагнітних мікрочастинок різних форм в швидко осцилюючому магнітному полі в потоці рідини // *Електроніка і зв'язь*. 2009. № 4–5. С. 247–251.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1965. 204 с.
12. Бюшгенс Г.С., Студнев Р.В. Динамика самолета. Пространственное движение. М.: Машиностроение, 1983. 320 с.
13. Korneva G., Ye H., Gogotsi Yu. Carbon nanotubes loaded with magnetic particles // *Nano Letters*. 2005. Vol. 5. № 5. Pp. 879–884.

Надійшла до редакції 06.09.2010

УДК 517.929

Джалладова І.А., д.ф.-м.н., доц.
Іванов А.Ф., к.ф.-м.н., проф.
Свіщук А.В., д.ф.-м.н., проф.
Хусайнов Д.Я., д.ф.-м.н., проф.

Стійкість та оцінки збіжності розв'язків лінійного стохастичного рівняння нейтрального типу

Розглядається лінійне стохастичне функціонально-диференціальне рівняння нейтрального типу. З використанням функціоналу Ляпунова - Красовського квадратичного виду з експоненціальним множником отримано умови експоненціальної стійкості. Обчислено коефіцієнти згасання розв'язків.

Ключові слова: функціонально-диференціальне рівняння стохастичного типу, функціонал Ляпунова-Красовського, експоненціальна стійкість

Представлено проф., д.т.н. Гаращенко Ф.Г.

E-mail: irada-05@mail.ru, af11@psu.edu, aswish@math.ucalgary.ca, dkh@unicyb.kiev.ua.

Introduction

Theory and applications of functional differential equations form an important part of modern nonlinear dynamics. Those equations are natural mathematical models for various real life phenomena where the aftereffects are intrinsic features of their functioning. In recent years functional differential equations have been used to model processes in diverse areas such as population dynamics and ecology, physiology and medicine, economics and other natural sciences [6,8,15,19]. In many of the models the initial data and parameters are subject to random perturbations, or the dynamical systems themselves represent stochastic processes. This leads to consideration of stochastic functional differential equations [7,11, 20].

One of the principal problems of the corresponding mathematical analysis of equations is a comprehensive study of their global dynamics and related prediction of long term behaviors in applied models. Of those the problem of stability of a particular solution plays a significant role. The latter is typically reduced to the study of stability of the zero solution of a transformed system. In cases of complex systems the study of local stability is usually approached by considering the corresponding

Dzhalladova I.A., Doctor of Science
Ivanov A.F., Ph.D., Professor
Khusainov D.Ya., Doctor of Science, Professor
Swishukchuk A.V., Doctor of Science, Professor

Stability and rate convergence estimates for a linear neutral stochastic equation

A linear stochastic functional differential equation of neutral type is considered. Sufficient conditions for the exponential stability are derived by using Lyapunov-Krasovskii functionals of quadratic form with exponential factors. Upper bound estimates for the exponential rate of decay are derived in terms on the equations coefficients.

Key Words: functional differential equations of neutral type, Lyapunov - Krasovskii functionals, exponential stability

system linearized about the zero solution. Therefore, the study of stability of linear equations represents the first natural and important step in the analysis of more complex nonlinear systems.

When applying the mathematical theory to real life problems the mere statement about the stability in the system is hardly sufficient. In addition to the fact of the stability itself it is of significant importance to obtain constructive and verifiable estimates on the rate of convergence of solutions in time. One of the principal available tools in the related studies is the second Lyapunov method. For the functional differential equations the method has been developing in recent years in two main directions. The first one is the method of finite Lyapunov functions with the additional assumption of Razhumikhin [14, 22]. The second one is the method of Lyapunov-Krasovskii functionals [17,18]. For the stochastic functional differential equations some aspects of these two directions of research have been developed in papers [1, 3,4,12,13,17,16,23,24,25] and [17,16,26,27,28], respectively. In the present paper, by using the method of Lyapunov-Krasovskii functionals, we derive sufficient conditions for stability together with the rate of convergence to zero of solutions for a

class of linear stochastic functional differential equation of neutral type.

2. Statement of problem

Consider the following linear stochastic differential difference equation of neutral type

$$d[x(t) - cx(t - \tau)] = [a_0 x(t) + a_1 x(t - \tau)]dt + [b_0 x(t) + b_1 x(t - \tau)]dw(t) \quad (1)$$

Where $x(t) \in R^1$, a_0 , a_1 , b_0 , b_1 , c – are all real constants, $\tau > 0$ – constant delay, $w(t)$ – a standard scalar Wiener process with

$$M\{dw(t)\} = 0, \quad M\{(dw(t))^2\} = dt, \\ M\{dw(t)dw(t_1)\} = 0, \quad t \neq t_1.$$

An F_t – measurable random process

$\{x(t) \equiv x(t, \omega)\} \in R^1$ is called a solution of equation (1) if it satisfies with the probability one the following integral equation

$$x(t) = cx(t - \tau) + [x(0) - cx(-\tau)] + \int_0^t [a_0 x(s) + a_1 x(s - \tau)]ds + \int_0^t [b_0 x(s) + b_1 x(s - \tau)]dw(s),$$

and the initial conditions $x(t) = \varphi(t)$, $x'(t) = \psi(t)$, $t \in [-\tau, 0]$. Here and for the remainder of the paper we will be assuming that the initial functions $\varphi(t)$, $\psi(t)$ – are continuous random processes. Under those assumptions the solution to the corresponding initial value problem for equation (1) exists and is unique for $t > 0$ up to its stochastic equivalent solution on the space (Ω, F, P) .

We shall make use of the following norms for solutions of equations (1)

$$\|x(t)\|_r = \max_{-r \leq s \leq 0} \|x(s + t)\| \\ \|x(t)\|_{r, \beta}^2 = \int_{-r}^0 e^{\beta s} x^2(t + s)ds, \quad (2)$$

As it is well known, the zero solution of equations (1) is called stable in the square mean if for every $\varepsilon > 0$ there exist $\delta(\varepsilon) > 0$, such that every solutions $x(t)$ of equations (1) with initial conditions $x(t) \equiv \varphi(t)$, $x'(t) = \psi(t)$ satisfies $M\{x(t)^2\} < \varepsilon$, are such that $\max_{-\tau \leq s \leq 0} \|\varphi(t)\| < \delta(\varepsilon)$ and $\max_{-\tau \leq s \leq 0} \|\psi(s)\| < \delta(\varepsilon)$.

If the zero solutions is stable in the square mean and $\lim_{t \rightarrow +\infty} M\{x(t)^2\} = 0$, then it is called asymptotically stable in the square mean.

If there exist positive constants $N > 0$ and $\gamma > 0$ such that the inequality holds

$$M\{\|x(t)\|_{r, \beta}^2\} < N\|x(0)\|_r^2 e^{-\gamma t},$$

then the zero solutions is called exponentially (γ, β) – integrally stable in the square mean.

In this paper we derive constructive estimates of the exponential (γ, β) – integrable stability in the square mean of the differential-difference equation with constant delay (1). We employ the method of stochastic Lyapunov-Krasovskii functionals.

In papers [16, 17, 26, 28] the functional is chosen to be of the form

$$V[x(t), t] = h[x(t) - cx(t - \tau)]^2 + g \int_{-\tau}^0 x^2(t + s)ds,$$

where constants $h > 0$, $g > 0$ are such the total stochastic differential of the functional along solutions is negative definite. In the present paper we add exponential factors to the functional so that it has following form

$$V[x(t), t] = e^{\gamma t} \left\{ h[x(t) - cx(t - \tau)]^2 + g \int_{-\tau}^0 e^{\beta s} x^2(s)ds \right\}$$

where constants $h > 0$, $g > 0$, $\gamma > 0$, $\beta > 0$ are to be determined later. This allows us not only to derive sufficient conditions for the stability of the zero solution but also obtain coefficient estimates on the rate of the exponential decay of solutions. Since the functional is homogeneous in both h and g we can set $h = 1$. By changing variables in the integral by $t + s = \xi$ we obtain

$$V[x(t), t] = e^{\gamma t} \left\{ [x(t) - cx(t - \tau)]^2 + g \int_{t-\tau}^t e^{-\beta(t-\xi)} x^2(\xi) d\xi \right\} \quad (3)$$

By using the earlier introduced norms (2) the functional (3) allows for the following two-sided estimates

$$ge^{\gamma t} M\{\|x(t)\|_{r, \beta}^2\} \leq M\{V[x(t), t]\} \leq e^{\gamma t} (1 + c^2) M\{x^2(t) + x^2(t - \tau)\} + ge^{\gamma t} M\{\|x(t)\|_{r, \beta}^2\} \quad (4)$$

Introduce the following notations

$$S[g, \beta, \gamma] = \begin{bmatrix} A - \gamma - g & B + \gamma c \\ B + \gamma c & g e^{-\beta \tau} - \gamma^2 + C \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$A = -2a_0 - b_0^2, \quad B = -a_1 + a_0 c - b_0 b_1, \\ C = 2a_1 c - b_1^2, \quad (6)$$

and let $\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma])$ be the smallest eigenvalue of matrix $S[g, \beta, \gamma]$.

3. Main results.

Theorem 3.1. Suppose there exist positive constant $\beta > 0$, $g > 0$, $\gamma > 0$, $\beta > \gamma$ such that the following inequalities are satisfied $\Delta_1 = A - \gamma - g > 0$,

$$\Delta_2 = (A - \gamma - g)(g e^{-\beta \tau} - \gamma^2 + C) - (B + \gamma c)^2 > 0, \quad (7)$$

where constants A, B, C are defined by (6).

Then the zero solution of equations (1) is exponentially (γ, β) -integral stable in the square mean. Moreover, every solution $x(t)$ satisfies the following convergence estimate for all $t \geq 0$,

$$M \left\{ \|x(t)\|_{\tau, \beta}^2 \right\} \leq e^{-\Theta(t, \tau)} \left[\sqrt{\frac{1+c^2}{g}} (\|x(0)\| + \|x(-\tau)\|) + \|x(0)\|_{\tau, \beta} \right], \quad (8)$$

where Θ is defined by

$$\Theta(g, \beta, \gamma) = \min \left\{ \beta, \frac{\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma])}{1+c^2} + \gamma \right\}. \quad (9)$$

Proof. In order to arrive at conditions (7) and the rate of solutions' decay (8) we shall apply the method of Lyapunov-Krasovskii functionals to the one given by formula (3).

By using the Ito formula we evaluate the stochastic differential of functional (3) as follows $dV[x(t), t] = \gamma x^T \times$

$$\times \left\{ [x(t) - cx(t-\tau)]^2 + g \int_{t-\tau}^t e^{-\beta(t-s)} x^2(s) ds \right\} dt + \\ + e^\gamma \{ 2[x(t) - cx(t-\tau)] d[x(t) - cx(t-\tau)] + \\ + g[b_0 x(t) + b_1 x(t-\tau)]^2 (dw)^2 +$$

$$+ g \left[x^2(t) - e^{-\beta \tau} x^2(t-\tau) - \beta \int_{t-\tau}^t e^{-\beta(t-s)} x^2(s) ds \right] dt \}$$

By taking the mathematical expectation we obtain

$$M \frac{d}{dt} \{ V[x(t), t] \} = e^\gamma M \{ \gamma [x(t) - cx(t-\tau)]^2 + \\ + 2[x(t) - cx(t-\tau)] [a_0 x(t) + a_1 x(t-\tau)] + \\ + [b_0 x(t) + b_1 x(t-\tau)]^2 + g x^2(t) - g e^{-\beta \tau} x^2(t-\tau) - \\ - g(\beta - \gamma) \int_{t-\tau}^t e^{-\beta(t-s)} x^2(s) ds \}.$$

By using notation (5) and (6) the last expression can be rewritten in the following vector-matrix form

$$\frac{d}{dt} M \{ V[x(t), t] \} = \\ - e^\gamma M \left\{ \begin{pmatrix} x(t) \\ x(t-\tau) \end{pmatrix} \times S[g, \beta, \gamma] \times \begin{pmatrix} x(t) \\ x(t-\tau) \end{pmatrix} \right\} dt - \\ - g(\beta - \gamma) e^\gamma M \left\{ \int_{t-\tau}^t e^{-\beta(t-s)} x^2(s) ds \right\},$$

with the notations (5) and (6) and according to the Sylvester criterion [30] assumptions (7) imply that matrix $S[g, \beta, \gamma]$ is positive definite. Assume now (7) to hold. Then the smaller eigenvalue of matrix $S[g, \beta, \gamma]$ is positive, that is

$$\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma]) = \frac{1}{2} [\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 4\Delta_2}] > 0$$

$$\sigma = A + C - \gamma(1+c^2) + g(e^{-\beta \tau} - 1)$$

and the full derivative of the mathematical expectation of the Lyapunov functional is negative definite. The zero solution of equation (1) is then asymptotically stable.

We shall show next that solutions of equation (1) decay exponentially by calculating the corresponding exponential rate.

Choose the constants β and γ to satisfy $\beta - \gamma > 0$.

Then the full derivative of the mathematical expectation for the Lyapunov functional satisfies the inequality

$$\frac{d}{dt} M \{ V[x(t), t] \} \leq \\ - e^\gamma \lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma]) M \{ x^2(t) + x^2(t-\tau) \} - \\ - g(\beta - \gamma) e^\gamma M \{ \|x(t)\|_{\tau, \beta}^2 \}. \quad (10)$$

Let us derive conditions that are necessary to impose on the coefficients of equation (1) and parameters of the Lyapunov-Krasovskii functional (3) in order for the following inequality to hold

$$\frac{d}{dt} M \{ V[x(t), t] \} \leq -\zeta M \{ V[x(t), t] \}, \quad \zeta > 0.$$

We use a sequence of the following calculations

(1) Rewrite the right hand side of inequality (4) in the form

$$-e^{\gamma} M \left\{ \|x(t)\|_{\tau, \beta}^2 \right\} \|x(t)\|_{\tau, \beta}^2 \leq -\frac{1}{g} M \{V[x(t), t]\} + \\ + e^{\gamma} \frac{1+c^2}{g} M \{x^2(t) + x^2(t-\tau)\}$$

and substitute the latter into inequality (10). This results in

$$\frac{d}{dt} M \{V[x(t), t]\} \leq \\ \leq -e^{\gamma} \lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma]) M \{x^2(t) + x^2(t-\tau)\} + \\ + g(\beta - \gamma) \times \\ \left\{ -\frac{1}{g} M \{V[x(t), t]\} + e^{\gamma} \frac{1+c^2}{g} M \{x^2(t) + x^2(t-\tau)\} \right\}$$

or equivalently as

$$\frac{d}{dt} M \{V[x(t), t]\} \leq -(\beta - \gamma) M \{V[x(t), t]\} - \\ - e^{\gamma} \left\{ \lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma]) - (\beta - \gamma)(1+c^2) \right\} \times \\ \times M \{x^2(t) + x^2(t-\tau)\}$$

If the equation's coefficients and the functional's parameters are such that

$$\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma]) > (\beta - \gamma)(1+c^2),$$

then the following holds

$$\frac{d}{dt} M \{V[x(t), t]\} \leq -\zeta M \{V[x(t), t]\},$$

where $\zeta = \beta - \gamma$.

(11)

2) Rewrite the right hand side of inequality (4) in the form

$$-e^{\gamma} M \{x^2(t) + x^2(t-\tau)\} \leq -\frac{1}{1+c^2} M \{V[x(t), t]\} + \\ + e^{\gamma} \frac{g}{1+c^2} M \{x(t)\|_{\tau, \beta}^2\}$$

This result in and substitute the latter again into inequality (10).

$$\frac{d}{dt} M \{V[x(t), t]\} \leq \lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma]) \times$$

$$\times \left\{ -\frac{1}{1+c^2} M \{V[x(t), t]\} + e^{\gamma} \frac{g}{1+c^2} M \{x(t)\|_{\tau, \beta}^2\} - \right. \\ \left. + e^{\gamma} g(\beta - \gamma) M \{x(t)\|_{\tau, \beta}^2\} \right\}.$$

or, equivalently, in the inequality

$$\frac{d}{dt} M \{V[x(t), t]\} \leq -\frac{\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma])}{1+c^2} V[x(t), t] - \\ - e^{\gamma} g \left\{ (\beta - \gamma) - \frac{\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma])}{1+c^2} \right\} \|x(t)\|_{\tau, \beta}^2.$$

If the parameter involved are such that the inequality

$$\beta - \gamma > \frac{\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma])}{1+c^2},$$

holds then we deduce

$$\frac{d}{dt} M \{V[x(t), t]\} \leq -\zeta M \{V[x(t), t]\}, \\ \zeta = \frac{\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma])}{1+c^2}. \quad (12)$$

By simultaneously solving both differential inequalities (11) and (12) we see that

$$M \{V[x(t), t]\} \leq V[x(0), 0] e^{-\zeta t},$$

$$\zeta = \min \left\{ \beta - \gamma, \frac{\lambda_{\min}(S[g, \beta, \gamma])}{1+c^2} \right\}.$$

By integrating the two-sided inequality (4) for the Lyapunov-Krasovskii functional $V[x(t), t]$, we obtain

$$e^{\gamma} g M \{x(t)\|_{\tau, \beta}^2\} \leq M \{V[x(t), t]\} \leq V[x(0), 0] e^{-\zeta t} \leq \\ \leq \left\{ (1+c^2) [x^2(0) + x^2(-\tau)] + g \|x(0)\|_{\tau, \beta}^2 \right\} e^{-\zeta t}, \quad t \geq 0.$$

This results in the final estimate for the rate of decay of solutions given by the following inequality

$$M \{x(t)\|_{\tau, \beta}^2\} \leq e^{-\theta(g, \beta, \gamma)t} \times \\ \times \left[\sqrt{\frac{1+c^2}{g}} (|x(0)| + |x(-\tau)|) + \|x(0)\|_{\tau, \beta} \right], \quad t \geq 0,$$

where

$$\theta(g, \beta, \gamma) = \zeta + \gamma,$$

is given by formula (9).

Suppose that constants g, β, γ are such that the assumptions (7) are satisfied with the corresponding rate (8) of decay of solutions taking place. In the stability situation one now has a flexibility to choose the parameters g, β, γ . Consider here a choice for the parameters which can be viewed in a sense as the best one.

According to the Silvester criterion the inequalities (7) are sufficient for matrix $S[g, \beta, \gamma]$ to be positive definite.

We will seek for the value of parameter g which maximizes the value of of the determinant Δ_2 .

This can be viewed as the best case for the positive definiteness of matrix $S[g, \beta, \gamma]$ since its minimal positive eigenvalue is then the largest possible one.

Necessary condition for Δ_2 to have a local extreme value in g is

$$\begin{aligned} \frac{d}{dg} \Delta_2 &= \frac{d}{dg} [(A - \gamma - g)(ge^{-\beta\tau} - \gamma c^2 + C) - \\ &- (B + \gamma c^2)^2] = \\ &= -2ge^{-\beta\tau} + [(A - \gamma)e^{-\beta\tau} + (\gamma c^2 - C)] = 0 \end{aligned}$$

This implies that the corresponding value of g is given by

$$g_0 = \frac{1}{2} [(A - \gamma) + e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)].$$

Accordingly g_0 the corresponding matrix $S[g, \beta, \gamma]$ has the form

$$S[g_0, \beta, \gamma] = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} \end{bmatrix},$$

$$\alpha_{11} = \frac{1}{2} [(A - \gamma) - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)], \quad \alpha_{12} = B + \gamma c,$$

$$\alpha_{22} = \frac{1}{2} [e^{-\beta\tau}(A - \gamma) - (\gamma c^2 - C)],$$

The quantities σ and Δ_2 are given by

$$\sigma = \frac{1}{2} (1 + e^{-\beta\tau}) [(A - \gamma) - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)],$$

$$\Delta_2 = \frac{1}{4} e^{-\beta\tau} [(A - \gamma) - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)]^2 - (B + \gamma c)^2.$$

This implies that the smaller solution of the characteristic equation

$$\lambda^2 - \sigma\lambda + \Delta_2 = 0$$

give

$$\begin{aligned} \lambda_{\min}(S[g_0, \beta, \gamma]) &= \frac{1}{2} [\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 4\Delta_2}] = \\ &= \frac{1}{4} \{ (1 + e^{-\beta\tau}) [(A - \gamma) - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)] - (1 - e^{-\beta\tau}) \times \\ &\times \sqrt{[(A - \gamma) - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)]^2 + 16(B + \gamma c)^2} \}. \end{aligned}$$

Therefore, the above calculation establishes the following result.

Theorem 3.2. Suppose there exist constants $\beta > \gamma > 0$ such that the following inequality is satisfied

$$A - \gamma - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C) > 2e^{\frac{1}{2}\beta\tau} |B + \gamma c|,$$

where

$$A = -2a_0 - b_0^2, \quad B = -a_1 + a_0c - b_0b_1,$$

$$C = 2a_1c - b_1^2.$$

Then the zero solution of equation (1) is asymptotically stable in the square mean.

Moreover, every solution $x(t)$ satisfies the following convergence estimate for all $t \geq 0$

$$\begin{aligned} M \{ \|x(t)\|_{r,\beta}^2 \} &\leq e^{-\theta(\beta,\gamma)t} \left[\sqrt{\frac{1+c^2}{g}} (|x(0)| + |x(-\tau)|) + \right. \\ &\left. + \|x(0)\|_{r,\beta} \right] \end{aligned}$$

where

$$\theta(\beta, \gamma) = \min \left\{ \beta, \frac{\lambda_{\min}(S[g_0, \beta, \gamma])}{1+c^2} + \gamma \right\},$$

$$\begin{aligned} \lambda_{\min}(S[g_0, \beta, \gamma]) &= \\ &= \frac{1}{4} \{ (1 + e^{-\beta\tau}) [(A - \gamma) - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)] - \\ &- (1 - e^{-\beta\tau}) \times \\ &\times \sqrt{[(A - \gamma) - e^{\beta\tau}(\gamma c^2 - C)]^2 + 16(B + \gamma c)^2} \}. \end{aligned}$$

Reference

1. A.S. Bychkov and D.Y. Khusainov, An exponential decay of solutions of neutral type stochastic equations. *Random Operators and Stochastic Equations*, no. 3 (1995), 245-256, (in Russian)
2. O. Diekmann, S. van Gils, S. Verduyn Lunel, and H.O. Walther, Delay Equations: Complex, Functional, and Nonlinear Analysis. *Springer-Verlag, New York*, 1995.
3. I. A. Dzhalladova, Investigation of the stabilization of a mathematical model of a dynamic system under random perturbations in the resonance mode. *Ukrainian Math. J.* **49**, no. 9 (1997), 1176-1181. (in Russian)
4. I. A. Dzhalladova, Investigation of a system of linear differential equations with random coefficients. *Ukrainian Math. J.* **50**, no. 8 (1998), 1137-1144. (in Russian)
5. L.E. Elsgolts and S.B. Norkin, Introduction to Theory of Differential Equations with Deviating Argument. *Moscow, Science Publ. Co.*, 1970, 240 pp. (in Russian)
6. T. Erneux, A book on applied functional differential equations.(exact ref. to be inserted)

7. I.I. Gikhman and A.V. Skorokhod, Stochastic Differential Equations. Kiev, *Naukova Dumka Publ. Co.*, 1968, 354 pp. (in Russian)
8. L.Glass and M.C.Mackey, From Clocks to Chaos, The Rhythms of Life. Princeton University Press, 1988.
9. J.K. Hale and S.M. Verduyn Lunel, Introduction to Functional Differential Equations. *Springer Applied Mathematical Sciences*, vol. 99, 1993.
10. A.Swishchuk, Kazmerchuk Y. "Stability of Stochastic Delay Differential Ito's Equations with Poisson Jumps and Markovian Switchings. Application to Financial Models". *Theory Probab. Mathem. Stat.*, v. 64 (2001) (Translated: *Trans. of AMS*, N64, 2002),...
11. R.Z. Khasminskii, Stability of Systems of Differential Equations under Stochastic Perturbations of Parameters. *Moscow, Science Publ. Co.*, 1969, 368 pp. (in Russian)
12. D.Y. Khusainov and A.S. Bychkov, Stability of neutral stochastic systems with small deviation of argument, *Differential Equations* **28**, no. 12 (1992), 2060-2069. (in Russian)
13. D.Y. Khusainov and A.S. Bychkov, Stability estimates of neutral stochastic systems with deviating argument. *Ukrainian Math. J.* **45**, no. 6 (1993), 834-842. (in Russian)
14. D.Y. Khusainov and A.V. Shatyrko, Method of Liapunov Functions in the Study of Stability Functional Differential Systems. Kiev, Publishing Co. of Kiev National University, 1997, 236 pp. (in Russian)
15. V. Kolmanovskii and A. Myshkis, Introduction to the Theory and Applications of Functional Differential Equations. Ser.: Mathematics and Its Applications. 463. Kluwer Academic Publishers, 1999, 648 pp.
16. D.G. Korenevskii, Stability of Dynamical Systems under Random Perturbations of Parameters. Algebraic Criteria. Kiev, *Naukova Dumka Publ. Co.* 1989, 208 pp. (in Russian)
17. D.G. Korenevskii, Stability of Solutions in Deterministic and Stochastic Differential-Difference Equations (Algebraic Criteria). Kiev, *Naukova Dumka Publ. Co.*, 1992, 148 pp. (in Russian)
18. N.N. Krasovskii, Some Problems in the Stability Theory of Motion. Moscow, *Fiz.- Tek. Publishing Co.*, 1959. (in Russian)
19. Y. Kuang, Delay Differential Equations with Applications in Population Dynamics, Academic Press Inc. 2003, 398 pp. Series: Mathematics in Science and Engineering, Vol. 191.
20. G.J. Kushner, Stochastic Stability and Control. Moscow, *World Publ. Co.* 1969, 200 pp.
21. A.D. Myshkis, Linear Differential Equations with Delayed Argument, *Moscow, Science Publ. Co.*, 1972, 352 pp. (in Russian)
22. B.S. Razumikhin, Stability in Hereditary Systems. *Moscow, Science Publ. Co.*, 1988, 112 pp. (in Russian)
23. I.G. Nechaeva and D.Y. Khusainov, Derivation of the stability estimates for solutions of stochastic functional differential equations. *Differential Equations*, **28**, no. 3 (1992), 405-414. (in Russian)
24. I.G. Nechaeva and D.Y. Khusainov, Investigation of the stability conditions of stochastic perturbed systems with delay. *Ukrainian Math. J.* **44**, no. 8 (1992), 1060-1064. (in Russian)
25. I.G. Nechaeva and D.Y. Khusainov, The uniform in delay stability of a stochastic system with delay. *Differential Equations* **31**, no. 12 (1995), 2085-2087. (in Russian)
26. M.L. Sverdun, E.F. Tsarkov, and V.K. Yasinskii, Stability in Stochastic Modeling of Complex Dynamical Systems. *Svyatyn, "Nad Prutom" Publ. Co.* 1996, 448 pp. (in Ukrainian)
27. E.F. Tsarkov, Random Perturbations of Functional Differential Equations. *Riga, Zinante Publ. Co.* 1989, 421 pp. (in Russian)
28. E.F. Tsarkov and V.K. Yasinskii, Quasi-Linear Stochastic Functional Differential Equations. Riga, *Orientir Publ. Co.* 1992, 322 pp. (in Russian)
29. A. Ivanov, Yu. Kazmerchuk, A.Swishchuk "Theory, Stochastic Stability and Applications of Stochastic Delay Differential Equations: A Survey of Recent Results". *Differential Eq. and Dynamical Systems*, 11, no. 1-2, 55-115 (2003).
30. Gantmaher F.R. Theory of matrix. -M.: Nauka, 1988. - 548 p. (in Russian)

This research was done in part during the activities of the Research in Team Workshop "Global Dynamics of Stochastic Differential Delay Equations" (09rit141) held at the Banff International Research Station (BIRS) during June 21-28, 2009. A. Ivanov, D. Khusainov, and A. Swishchuk are grateful to the BIRS for the hospitality and support extended to the participants involved in the Workshop.

Надійшла до редколегії 06.09.2010

УДК 519.925.51

Кулян В.Р., к.т.н. доц.
Юнькова О.О., к.ф.-м.н.
Рутіцька В.В., к.т.н.

Про моделювання динаміки інвестицій

Розглядається проблеми побудови загальної математичної моделі функціонування виробничого підприємства та управління інвестиціями як задача оптимального керування динамічною системою.

Ключові слова: математична модель, інвестування, оптимальне керування.

*E-mail: V.Kulyan@gmail.com

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

В нинішній час математика широко застосовується при вивченні соціальних і економічних процесів. Причому поряд із традиційними статистичними та статичними методами все більше робіт присвячується динамічному математичному моделюванню як у детермінованих, так і у стохастичних постановках.

В роботі розглядається одна із задач інвестиційного менеджменту, пов'язана з побудовою та застосуванням математичної моделі виробничого підприємства для оптимізації його діяльності за рахунок керування інвестиціями.

Як правило, математичні моделі прикладних динамічних процесів описують лінійними параметрично заданими стаціонарними або нестаціонарними диференціальними або різницевиими рівняннями і задача параметричної ідентифікації є першою у процесі формулювання задачі та побудови розв'язку.

При аналізі нестаціонарних динамічних систем видно, що методи їх дослідження є досить складними, придатними лише невеликого класу систем. Класичний підхід зводиться до визначення базисних функцій, а потім, за використання процедури інтегрування, що ґрунтується на принципі суперпозиції, - до визначення реакції системи на різні входні сигнали. Базисні функції, що утворюють n незалежних розв'язків лінійного диференціального рівняння n -того порядку буває складно визначити. Для довільного лінійного диференціального рівняння зі змінними

V.R. Kulyan, Ph.D., Ass. Prof.
O.O. Yun'kova, Ph.D., Ass. Prof.
V.V. Rutytska, Ph.D.

On investment dynamic policy modeling

The problem of general mathematical model of enterprise construct and dynamic portfolio control for optimal investment management are investigated.

Key Words: mathematical model, investment management, optimal control.

коефіцієнтами загального методу визначення системи базисних функцій не існує.

Для лінійної нестаціонарної системи, яка описується диференціальним рівнянням n -того порядку, класичний підхід полягає у побудові базисних функцій у вигляді нескінченних поліномів і визначенні реакцій методом варіації довільної сталої. Цей метод застосовано до побудови базисних функцій рівнянь: Бесселя, Мат'є, Лежандра, Лагерра, Вебера, Ейрі, гіпергеометричних рівнянь. Побудова ж базисних функцій для інших рівнянь є дуже складною справою. У випадку нестаціонарної системи, яка описується рівнянням стану, застосовують ітеративний метод інтегрування, який приводить до фундаментальної матриці, яка неявно залежить від базисних функцій.

З огляду на сказане раніше, побудову математичної моделі, формулювання постановки задачі та алгоритму її розв'язання будемо здійснювати у класі параметрично заданих лінійних стаціонарних диференціальних систем.

Спочатку сформулюємо теоретичні засади та побудуємо алгоритмічні процедури, необхідні для розв'язання задачі.

Розглянемо задачу оптимального керування динамічною системою із закріпленням одним кінцем траєкторії та фіксованим часом у такому вигляді

$$\frac{dx(t, p)}{dt} = f(x(t), u(t), p, t), \quad (1)$$

$x(t_0) = x_0$, $t_0 \leq t \leq T$, $u(t) \in U$, де U - множина допустимих керувань; p - вектор параметрів моделі. Для параметрично заданої математичної моделі (1) сформулюємо оптимізаційну задачу

$$I(u(t), t) = \min_{u \in U} \left(\int_{t_0}^T f_0(x(t), u(t), p, t) dt + \Phi(x(T)) \right). \quad (2)$$

Вважаємо, що функція $\Phi(x(T))$ – відома. Тут моменти часу t_0, T задані; $u = (u_1, \dots, u_r)$, $x = (x_1, \dots, x_n)$, $f = (f_1, \dots, f_n)$; керування $u = u(t)$ – кусково-неперервною функцією на заданому відрізку; $f_i(x, u, p, t)$ та $\Phi(x(T))$ – задані функції; параметр $p \in P$, де P – обмежена замкнута множина. Таким чином, переходимо до розв'язання задачі

$$u^0 = \arg \min_{u \in U} \max_{p \in P} I(u, p),$$

де символом u^0 позначено оптимальне керування.

На цьому етапі формулювання ітераційної оптимізаційної процедури задамо деяке початкове значення $u_0 \in U$, тоді відповідне значення параметрів моделі p_0 знайдемо як розв'язок задачі

$$p_0 = \arg \max_{p \in P} I(u_0, p). \quad (3)$$

Відповідно на k -тому кроці процедури отримаємо

$$p_k = \arg \max_{p \in P} I(u_k, p).$$

Згідно принципу максимуму [3], умова доповнюючої нежорсткості має вигляд

$$\varphi(T) = -V_x \Phi(x(T), u(T)), \quad (4)$$

де символом V_x позначено градієнт функції Φ за змінною x . Парі $(u(t), x(t))$ поставимо у відповідність систему лінійних диференціальних рівнянь відносно змінних $\varphi(t) = (\varphi_1(t), \dots, \varphi_n(t))$:

$$\frac{d\varphi_i(t)}{dt} = -V_{x_i} f(x(t), u(t), p, t) \varphi(t) +$$

$$+ V_{x_i} f_0(x(t), u(t), p, t), i = \overline{1, n}.$$

Ця система лінійна і однорідна, тому при довільних початкових умовах для φ вона допускає єдиний розв'язок, визначений на всьому інтервалі часу, для якого побудуємо керування $u(t)$ та відповідну фазову траєкторію $x(t)$. Для визначення $\varphi(T)$, як і раніше, скористаємось умовою

$$\varphi(T) = -V_x \Phi(x(T), u(T)) \quad (6)$$

і для деякого крокового множника h та довільного моменту часу t такого, що $t_0 \leq t \leq T$, можемо визначити

$$\varphi(t+h) = \varphi(t) + h V_x f(x(t), u(t), p, t) \varphi(t) -$$

$$- h V_x f_0(x(t), u(t), p, t). \quad (7)$$

Повторюючи наведену вище процедуру визначимо $\varphi(t_0)$. Таким чином, маємо можливість сформулювати задачу Коші для $\varphi(t)$

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -V_x f(x(t), u(t), p, t) \varphi(t) +$$

$$+ V_x f_0(x(t), u(t), p, t),$$

$$\varphi(t_0) = \varphi_0.$$

і, підставивши знайдене значення функції $\varphi(t)$ в рівняння моделі, знайдемо оптимальний розв'язок $u''(t)$, такий, що

$$u^0 = \arg \max_{u \in U} ((\varphi^k(t), f_u(x, u_k, p_k, t)) -$$

$$- f_{0_u}(x, u_k, p_k, t)). \quad (8)$$

Скориставшись цим розв'язком, перейдемо до розв'язання траєкторної задачі

$$x(t) = f(x(t), u^0(t), t), \quad x(t_0) = x_0. \quad (9)$$

Умову зупинки процедури побудови оптимального керування сформулюємо, використавши $\Phi(x(T))$

$$\|\varphi_k(T) - V_x(\Phi(x_k(T)))\| < \varepsilon, \quad (10)$$

де $\varepsilon > 0$ – деяке наперед задане число, яке задається в залежності від умов функціонування системи і характеризує відхилення розрахункової траєкторії $x_k(t)$, отриманої при керуванні $u_k(t)$ від умови на правому кінці.

За умови невиконання нерівності (10) завершимо пошук оптимальних значень параметрів математичної моделі (1), інакше – визначимо

$$\varphi_{k+1}(T) = [V_x \Phi(x^0(T), u^0) - \varphi_k(T)]h + \varphi_k(T),$$

і повторимо цикл операцій з формування нового керування $u_k(t)$ та траєкторії фазових змінних $x_k(t)$.

Наведену вище процедуру з моделювання динаміки системи керування застосуємо для оптимізації інвестиційної діяльності підприємства, що виробляє продукцію і яке у своїй діяльності використовує як зовнішні інвестиції, так і інвестування з власних ресурсів.

Враховуючи загальні закономірності функціонування підприємств у ринковій економіці, побудуємо математичну модель, яка б встановлювала адекватний зв'язок між агрегованими змінними. Важливу роль при формуванні ресурсного потенціалу

підприємства відіграє зовнішній кредитно-інвестиційний фактор. Його вплив здійснюється через: державні інвестиції, інвестиції різних фондів підтримки підприємництва, кредитних ресурсів, що надаються банківською системою, кредитних ресурсів, що надаються іншими кредитними організаціями, інвестиційними фондами, іноземними інвесторами і т.д. Зовнішній кредитно-інвестиційний фактор значною мірою визначає динаміку розвитку підприємства. При цьому важливим виявляється як величина кредитно-інвестиційної підтримки і динаміка інвестицій у часі, так і інші умови її надання (плата за інвестиційний ресурс у вигляді процентної ставки за кредит, терміни повернення кредиту і т.д.).

Наведені вище міркування справедливі для групи підприємств, що належать одній галузі промисловості і управляються з одного центру.

В рамках означеної групи підприємств розглянемо взаємозв'язок між агрегованими змінними, такими як: об'єм випуску продукції підприємством, вартість основних виробничих фондів і темпи їх приросту, прибуток і чистий прибуток, сума податкових відрахувань і т.ін., що можуть бути описані системою рівнянь

$$z_i(t) = q_i * A_i(t), \quad (11)$$

$$M^0(t) = \sum_i ((1 - c_i) z_i(t) - N_i(t)). \quad (12)$$

Функцію $N_i(t)$ можемо записати у вигляді

$$N_i(t) = \tau_1 z_i(t) + \tau_2 k_{\alpha} (1 - \xi) M_i(t), \quad \text{як це пропонується, наприклад, у [4].}$$

$$\frac{dA_i(t)}{dt} = \xi (M_i(t) - N_i(t)) + w_i(t), \quad (13)$$

$$t \in [0, T], \quad \xi \in [0, 1], \quad k_{\alpha} \in (0, 1], \quad i = \overline{1, n},$$

де $z(t)$ – вартість виробленої підприємством у момент t продукції; q – показник фондівіддачі; $A(t)$ – вартість основних виробничих фондів; c – питома собівартість випуску продукції; $M^0(t)$ – загальний прибуток; $M(t)$ – чистий прибуток підприємства за вирахуванням податків; $N(t)$ – сума податків; ξ – частка чистого прибутку, що відраховується на

реінвестування; $w(t)$ – зовнішні інвестиції, які отримує підприємство.

Розглянемо область простору станів виробничої системи. Для кожної точки області визначимо такі величини:

$T(z, y, t)$ – щільність інвестицій;

$q(z, y, t)$ – щільність різниці об'ємів інвестування та використання інвестованих ресурсів;

$w(z, y, t)$ – щільність потоку інвестицій;

$p(z, y, t)$ – очікувана прибутковість інвестицій;

$\{k(z, y)\}$ – набір параметрів, що впливають на інвестування.

Необхідно, знаючи $g(z, y, t)$, $\{k(z, y)\}$, знайти $T(z, y, t)$, $w(z, y, t)$, $p(z, y, t)$.

Серед основних параметрів множини $\{k(z, y)\}$ розглядають вартість обслуговування ресурсів.

При побудові моделі будемо виходити з логічного припущення [4], що потік інвестицій спрямований за градієнтом очікуваної прибутковості

$$k \frac{w}{\|w\|} = \text{grad} p. \quad (14)$$

В силу матеріальної сутності промислових інвестицій має місце співвідношення

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \text{div} p = q, \quad (15)$$

яке пов'язує щільність інвестицій, потоки і різницю між об'ємом інвестування та використанням інвестованих ресурсів. Динаміка прибутковості інвестицій опосередковано визначається різницею між об'ємом попиту D та пропозиції S

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \xi_1 (D - S), \quad (16)$$

де ξ_1 – деякий параметр, що залежить, взагалі кажучи, від умов інвестування. З іншого боку, динаміка щільності інвестицій також пов'язана із пропозицією і споживанням

$$\frac{\partial T}{\partial t} = S - D. \quad (17)$$

Таким чином, математична модель для щільності потоку інвестицій w має вигляд

$$w_i(t) = \frac{dA_i(t)}{dt} - \xi (M_i(t) - N_i(t)).$$

Після підстановки (17) у (16) отримаємо

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \xi_1 \left(\operatorname{div} \frac{dA_1(t)}{dt} - \xi(M_1(t) - N_1(t)) - g \right). \quad (18)$$

В результаті отримано модель формування потоків інвестицій, яка описує динаміку вартості інвестицій. Варто відмітити, що рівняння для потоків (18) за своєю структурою відповідає відомому рівнянню теплопровідності.

Критерієм вибору оптимальних керувань в процесі інвестування є функціонал

$$J(\omega(t)) = \int_0^T u_1(\omega, t) dt + u_2(\omega(T)),$$

де $u_1(\omega, t)$, $u_2(\omega)$ – монотонно зростаючі, увігнуті за ω функції корисності. Клас допустимих керувань визначається таким чином, щоб забезпечити існування розв'язку рівняння (18) і коректність визначення функціонала якості, а також додаткові властивості, що відображають змістовну постановку задачі (наприклад, невід'ємність значення $z(t)$).

Траєкторне моделювання для сформульованої вище задачі здійснювалось на основі різницевих підходів з використанням методу змінних напрямів.

При побудові чисельної процедури математичного моделювання та оптимізації потоків інвестицій на основі статичних та динамічних моделей розглядається також задача ідентифікації параметрів ξ та ξ_1 .

У спрощеному формулюванні досліджувались статичні та одно крокові

постановки з подальшим переходом до багатокрокових неперервних.

В додаток до градієнтного методу першого порядку для отримання більш точного результату розглядався розклад нелінійностей до членів другого порядку, що дало можливість застосувати градієнтні методи другого порядку або методи других варіацій, які мають перевагу більш швидкої збіжності алгоритму оптимізаційної процедури. Застосування методу спряженого градієнта дало можливість, за рахунок побудови спряжених напрямків пошуку оптимуму, за m кроків мінімізувати додатньо-визначену квадратичну форму m змінних.

Список використаних джерел

1. Гаращенко Ф.Г., Кулян В.Р., Ругицкая В.В. Качественный анализ математических моделей инвестиционного менеджмента // Кибернетика и вычислительная техника. – 2005. – 148. – С. 3-10.
2. Крылов И.А., Черноусько Ф.Л. Алгоритм метода последовательных приближений для решения задач оптимального управления. М.: Наука, 1971. – 247 с.
3. Болтянский В.Г. Математические методы оптимального управления. -М.: Наука, 1969. – 408 с.
4. Багриновский К.А. Модели и методы экономической кибернетики. -М.: Экономика. -1973. – 163с.

Надійшла до редакції. 21.04.2010р.

УДК 519.8

Мащенко С.О., к. ф.-м. н. доц.,
Чуба Л.В., студентка

Узагальнення рівноваги Штакельберга на основі принципу індивідуальної оптимальності

Для гри в умовах несиметричної інформованості гравців формалізовані поняття рівноваг, які засновані на різних принципах оптимальності, між якими проведений порівняльний аналіз на основі принципу індивідуальної оптимальності.

Ключові слова: рівновага за Нешем, рівновага за Штакельбергом, коаліційна рівновага, індивідуально-оптимальна рівновага.

*E-mail: msomail@yandex.ru, liliya.chuba@gmail.com

Статтю представив д. т. н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Розглянемо гру G в нормальній формі $(X_i, u_i; i \in N^0)$, де $N^0 = \{0, 1, \dots, n\}$ - множина з $(n+1)$ -го гравця; X_i - множина стратегій гравця $i \in N^0$; $u_i(x)$ - його функція виграшу, яка визначена на множині ситуацій гри $X = \prod_{i \in N^0} X_i$ і

приймає дійсні значення. Кожен гравець прагне отримати по можливості більше значення своєї функції виграшу.

Гравець з нульовим індексом є повністю інформованим (знає не тільки свою функцію виграшу, але й функції виграшу інших гравців) і називається лідером. Інші гравці $i \in N^0 \setminus \{0\}$ не знають функцію виграшу лідера і називаються підлеглими. Позначимо $N = N^0 \setminus \{0\}$ множину підлеглих. В залежності від взаємної інформованості підлеглих і обраних ними принципів оптимальності своєї поведінки між учасниками цієї гри можуть виникати різні відношення, які можуть приводити до різних типів узагальнення рівноваги за Штакельбергом.

В цій роботі будуть розглядатись такі випадки:

- підлегли повністю неінформовані і обирають обережну поведінку;
- підлегли повністю інформовані стосовно функцій виграшу один іншого, при чому:
- діють некооперативно і переслідують власні цілі;
- об'єднуються в коаліції;

Mashchenko S.O., C.Sci(Phys-Math.), Ass.Prof.,
Chuba L.V., student

Generalization of Stackelberg equilibrium on the basis of principle of individual optimum

For the game in the conditions of asymmetrical being of players inform the formalized notions of equilibriums, which are based on different principles of optimum, between which the conducted comparative analysis on the basis of principle of individual optimum.

Keywords: Nash equilibrium, coalition equilibrium, Stackelberg equilibrium, individually optimum equilibrium.

- діють колективно або кооперативно;
- діють некооперативно, але мають спільну ціль.

Для кожного з цих випадків будуть формалізовані узагальнення рівноваги за Штакельбергом і на основі принципу індивідуальної оптимальності [1; 2] проведений їх порівняльний аналіз.

Обережна поведінка підлеглих. Нехай підлегли повністю неінформовані (кожен гравець знає лише свою функцію виграшу). Тоді при кожній фіксованій стратегії $x_0 \in X_0$ лідера, їх раціональна поведінка полягатиме в виборі обережних стратегій [2].

Позначимо

$$C_i(x_0) = \text{Arg max}_{x_i \in X_i} \min_{x_{N \setminus i} \in X_{N \setminus i}} u_i(x_0, x_i, x_{N \setminus i})$$

- множину обережних стратегій гравця $i \in N$ при фіксованій стратегії лідера $x_0 \in X_0$, а

$$a_i(x_0) = \max_{x_i \in X_i} \min_{x_{N \setminus i} \in X_{N \setminus i}} u_i(x_0, x_i, x_{N \setminus i})$$

- його гарантований виграш, де $x_{N \setminus i} = (x_j)_{j \in N \setminus i}$ - набір стратегій $x_j \in X_j$ всіх підлеглих за винятком гравця i . Тоді множину $BR_i = \{x \in X \mid x_0 \in X_0; x_i \in C_i(x_0), i \in N\}$ будемо називати множиною обережних відповідей підлеглих на фіксовані стратегії лідера.

Узагальненою рівновагою за Штакельбергом при обережній поведінці підлеглих будемо

називати ситуацію $x^* \in X$, в якій
 $u_0(x^*) = \max_{x \in BR_0} u_0(x)$.

Оскільки повністю інформований лідер може передбачити поведінку підлеглих і побудувати множину BR_0 , то ситуація $x^* \in BR_0$ буде стабільною в тому сенсі, що і лідер, який максимізує свій виграш на множині прогнозованих ним обережних стратегій підлеглих, і підлеглі, які обирають раціональні стратегії при фіксованій стратегії x_0^* лідера, не будуть зацікавлені в зміні ситуації x^* .

Повна інформованість підлеглих. Нехай підлеглі повністю інформовані про функції виграшу один одного. В цих умовах їх раціональна поведінка може бути як обережною, так і ризикованою. У випадку обережної поведінки вони повністю ігнорують свою інформованість і отримують виграш не менший за гарантований. У випадку ризикованої поведінки вони заключають між собою необов'язкові угоди. Яка ситуація гри буде обрана ними як основа угоди (відповідно який принцип оптимальності вони будуть використовувати) визначається тим, як вони будуть обирати свої стратегії (некооперативно, коаліційно, колективно) і які цілі переслідують (особисті, коаліційні, колективні).

Якщо підлеглі діють некооперативно і переслідують особисті цілі, то основою такої угоди між підлеглими може бути рівновага за Нешем. Якщо підлеглі розбиті на коаліції і переслідують коаліційні цілі, то вони можуть обирати коаліційну рівновагу. Якщо підлеглі обирають свої стратегії колективно і мають загальну ціль або кооперативно обирають свої стратегії і в кожного є своя ціль, то обґрунтованим буде оптимальний за Парето набір їх стратегій. У випадку, коли підлеглі діють некооперативно, але переслідують спільну ціль – індивідуально-оптимальна рівновага. Слід зазначити, що в будь-якому з цих випадків основою угоди між підлеглими повинен бути індивідуально-раціональний набір стратегій підлеглих, оскільки у протилежному випадку у підлеглих буде відсутня мотивація укласти угоду і вони оберуть обережні стратегії.

Нагадаємо, що при фіксованій стратегії лідера $x_0 \in X_0$ набір стратегій підлеглих $x_N^* \in X_N = \prod_{i \in N} X_i$ називається індивідуально-раціональним [2], якщо виграш кожного гравця в ситуації $(x_0, x_N^*) \in X$ не менший за гарантований.

Позначимо

$$IR(x_0) = \{x_N \in X_N \mid u_i(x_0, x_N) \geq a_i(x_0), i \in N\}$$

- множину індивідуально-раціональних наборів стратегій підлеглих при фіксованій стратегії лідера $x_0 \in X_0$. Тоді

$$BR_{IR} = \{(x_0, x_N) \in X \mid x_N \in IR(x_0), x_0 \in X_0\}$$

будемо називати множиною індивідуально-раціональних відповідей підлеглих на фіксовану стратегію лідера.

Умови існування індивідуально-раціональних відповідей підлеглих встановлює наступне твердження.

Твердження 1. Нехай множини стратегій гравців X_i - компактні, $i \in N$, а їх функції виграшу $u_i(x_0, x_N)$, $i \in N$, - неперервні за $x_N \in X_N$. Тоді $BR_{IR} \neq \emptyset$.

Доведення твердження безпосередньо випливає з відомої теореми [2] про існування раціонально-індивідуальних ситуацій в іграх.

Оскільки очевидно, що $BR_{IR} \supseteq BR_0$, то $u_0(x^*) = \max_{x \in BR_{IR}} u_0(x) \geq \max_{x \in BR_0} u_0(x)$. Крім того

$u_i(x^*) \geq a_i$ для $\forall i \in N$. Таким чином, і лідеру, і підлеглим вигідніші умови повної інформованості підлеглих. Тому надалі будемо аналізувати лише цей випадок.

Слід відмітити, що не будь-яка ситуація $x^* \in BR_{IR}$ може бути узагальненням рівноваги за Штакельбергом, оскільки властивість індивідуальної раціональності набору стратегій підлеглих не є принципом оптимальності і не є мотивацією стабільності цього набору. Тому розглянемо різні принципи оптимальності для підлеглих і зробимо їх порівняльний аналіз.

Некооперативна поведінка підлеглих. Нехай підлеглі діють некооперативно і переслідують власні цілі. Тоді при кожній фіксованій стратегії $x_0 \in X_0$ лідера, їх раціональна поведінка буде полягати у виборі рівноваги за Нешем [2].

Позначимо $NE(x_0) = \{x_N \in X_N \mid u_i(x_0, x_N) \geq u_i(x_0, y_i, x_{-i}), \forall y_i \in X_i, i \in N\}$ - множину рівноваг за Нешем підлеглих при фіксованій стратегії лідера $x_0 \in X_0$, де $x_N = (x_i)_{i \in N}$ - набір стратегій $x_i \in X_i$ усіх підлеглих $i \in N$. Тоді

$$BR_{NE} = \{x = (x_0, x_N) \in X \mid x_0 \in X_0; x_N \in NE(x_0)\}$$

будемо називати множиною рівноважних за Нешем відповідей підлеглих на фіксованій стратегії лідера.

Узагальненою рівновагою за Штакельбергом при рівноважній за Нешем поведінці підлеглих будемо називати ситуацію $x^* \in X$, в якій

$$u_0(x^*) = \max_{x \in BR_{NE}} u_0(x).$$

Зв'язок множин рівноважних за Нешем BR_{NE} і індивідуально-раціональних BR_{IR} відповідей підлеглих на фіксованій стратегії лідера може бути встановлений на основі наступного твердження.

Твердження 2. Рівноважні за Нешем відповіді підлеглих на фіксованій стратегії лідера - індивідуально-раціональні, тобто $BR_{NE} \subseteq BR_{IR}$.

Доведення твердження випливає з відомої теореми [2] про індивідуальну раціональність рівноваг за Нешем гри G .

Коаліційна поведінка підлеглих. Нехай підлеглі діють коаліційно і переслідують коаліційні цілі. Тоді при кожній фіксованій стратегії $x_0 \in X_0$ лідера, їх раціональна поведінка буде полягати у виборі коаліційної рівноваги.

Нехай $Q = \{N(k)\}_{k \in K}$ деяке розбиття множини гравців на коаліції: $N(k) \subseteq N$, $k \in K$, для яких $N(i) \cap N(j) = \emptyset$, $i \neq j$; $\bigcup_{k \in K} N(k) = N$.

Позначимо

$$KE_Q(x_0) = \{x_N \in X_N \mid \forall k \in K \exists y_{N(k)} \in X_{N(k)}:$$

$$u_i(x_0, x_N) < u_i(x_0, y_{N(k)}, x_{N \setminus N(k)}), \forall i \in N(k),$$

$$\exists i \in N(k): u_i(x_0, x_N) < u_i(x_0, y_{N(k)}, x_{N \setminus N(k)})\}$$

- множини коаліційних рівноваг [1] підлеглих при фіксованій стратегії лідера $x_0 \in X_0$, де $X_{N(k)} = \{x_j\}_{j \in N(k)} \in X_{N(k)}$ - набір стратегій $x_j \in X_j$ підлеглих $j \in N(k)$, які входять до коаліції $k \in K$; $X_{N(k)} = \prod_{i \in N(k)} X_i$ - множина коаліційних стратегій, $k \in K$.

Тоді множину $BR_{KE(Q)} = \{x = (x_0, x_N) \in X \mid x_0 \in X_0; x_N \in KE_Q(x_0) \cap IR(x_0)\}$ будемо називати множиною коаліційних відповідей підлеглих на фіксованій стратегії лідера.

Узагальненою рівновагою за Штакельбергом при коаліційній поведінці підлеглих будемо називати ситуацію $x^* \in X$, в якій

$$u_0(x^*) = \max_{x \in BR_{KE(Q)}} u_0(x).$$

Слід зазначити, що при фіксованому розбитті $Q = \{N(k)\}_{k \in K}$ множини гравців на коаліції, множина $BR_{KE(Q)}$ може бути порожньою, але при достатньо слабких топологічних припущеннях (компактність множин стратегій підлеглих і напівнеперервність зверху їх функцій виграшу) завжди існує таке розбиття, зокрема, $|K|=1$, $Q=N$, при якому $BR_{KE(Q)} \neq \emptyset$ [2].

Колективна і кооперативна поведінка підлеглих. При колективній і кооперативній поведінці підлеглих для кожної фіксованої стратегії $x_0 \in X_0$ лідера, в основі раціональної поведінки підлеглих лежить набір оптимальних за Парето наборів їх стратегій. Позначимо

$$PO(x_0) = \{x_N \in X_N \mid \nexists y_N \in X_N:$$

$$u_i(x_0, x_N) \leq u_i(x_0, y_N), \forall i \in N;$$

$$\exists j \in N: u_j(x_0, x_N) < u_j(x_0, y_N)\}$$

- множину оптимальних за Парето наборів стратегій $x_N \in X_N$ підлеглих для фіксованої стратегії $x_0 \in X_0$ лідера.

Множину $BR_{PI} = \{x = (x_0, x_N) \in X \mid x_0 \in X_0; x_N \in PO(x_0) \cap IR(x_0)\}$ будемо називати множиною оптимальних за Парето індивідуально-раціональних відповідей підлеглих на фіксованій стратегії лідера.

Умови існування оптимальних за Парето індивідуально-раціональних відповідей підлеглих встановлює наступне твердження.

Твердження 3. Нехай множини стратегій гравців X_i - компактні, $i \in N$, а їх функції виграшу $u_i(x_0, x_N)$, $i \in N$, - неперервні за $x_N \in X_N$. Тоді $BR_{PI} \neq \emptyset$.

Доведення твердження безпосередньо випливає з відомої теореми [2] про існування оптимальних за Парето індивідуально-раціональних ситуацій в іграх.

Узагальненою рівновагою за Штакельбергом при оптимальній за Парето поведінці підлеглих будемо називати ситуацію $x^* \in X$, в якій

$$u_0(x^*) = \max_{x \in BR_{PI}} u_0(x).$$

Використання множини BR_{PI} для знаходження рівноваги за Штакельбергом буде обґрунтованим у випадку, коли підлеглі об'єднані в один колектив, який спільно обирає стратегії гравців і має спільну колективну ціль, що характеризується для кожного гравця його функцією виграшу. У випадку, коли у кожного підлеглого своя ціль, яка характеризується його

функцією виграну, підлеглі можуть обирати кооперативну модель поведінки. Позначимо BR_{CO} - підмножину ($BR_{CO} \subseteq BR_{PO}$) множини оптимальних за Парето індивідуально-раціональних відповідей підлеглих на фіксованій стратегії лідера, відповідно однією з моделей поведінки підлеглих (альфа-ядро, бета-ядро, N -ядро, вектор Шеллі і т.д. [2]). Тоді узагальненою рівновагою за Штакельбергом при кооперативній поведінці підлеглих будемо називати ситуацію $x^* \in X$, в якій $u_0(x^*) = \max_{x \in BR_{CO}} u_0(x)$.

Індивідуально-оптимальна поведінка підлеглих. Нехай підлеглі діють некооперативно, але мають загальну ціль. Тоді при кожній фіксованій стратегії $x_0 \in X_0$ лідера, їх раціональна поведінка буде полягати у виборі індивідуально-оптимальної рівноваги [1].

Позначимо

$$IOE(x_0) = \{x_N \in X_N \mid \forall i \in N \nexists y_i \in X_i : \\ u_i(x_0, x_N) < u_i(x_0, y_i, x_{N \setminus i}), \forall j \in N\}$$

- множину індивідуально-оптимальних рівноваг підлеглих при фіксованій стратегії лідера $x_0 \in X_0$. Тоді $BR_{IOE} = \{x = (x_0, x_N) \in X \mid x_0 \in X_0, x_N \in IOE(x_0) \cap IR(x_0)\}$ будемо називати множиною індивідуально-оптимальних відповідей підлеглих на фіксованій стратегії лідера.

Узагальненою рівновагою за Штакельбергом при індивідуально-оптимальній поведінці підлеглих будемо називати ситуацію $x^* \in X$, в якій $u_0(x^*) = \max_{x \in BR_{IOE}} u_0(x)$.

Нехай підлеглі - взаємно інформовані, діють некооперативно і мають спільну ціль, яка полягає в максимізації функції виграну всієї їхньої спільноти. Стабільність узагальненої рівноваги за Штакельбергом при їх індивідуально-оптимальній поведінці забезпечується наступним сценарієм гри. Лідер, знаючи функції виграну підлеглих, будує множину їх індивідуально-оптимальних відповідей BR_{IOE} . Потім він знаходить узагальнену рівновагу за Штакельбергом $x^* \in X$, в якій $u_0(x^*) = \max_{x \in BR_{IOE}} u_0(x)$, і пропонує підлеглим ситуацію x^* . Ситуація $x^* = (x_0^*, x_N^*)$ являється для них необов'язковою рекомендацією лідера. В силу того, що $x_N^* \in IOE(x_0^*)$, то будь-якому підлеглому $i \in N$ буде невигідно змінити свою

стратегію x_i^* на іншу $y_i \in X_i$ заради спільної цілі, оскільки при цьому функції виграну всіх підлеглих строго не покращаться.

Одну з цікавих властивостей множини BR_{IOE} встановлює наступна теорема.

Теорема 1. Має місце включення $BR_{IOE} \supseteq \{BR_{NE}, BR_{KE(Q)}, BR_{PO}\}$.

Доведення. Нехай $Q = \{N(k)\}_{k \in K}$ деяке розбиття множини підлеглих гравців на коаліції $N(k) \subseteq N, k \in K$; $N(i) \cap N(j) = \emptyset, i \neq j$; $\bigcup_{k \in K} N(k) = N$. Доведемо включення $BR_{KE(Q)} \subseteq BR_{IOE}$. Нехай $x^* \in BR_{KE(Q)}$.

Припустимо супротивне, що $x^* \notin BR_{IOE}$. Тоді $\exists i \in N \exists y_i \in X_i : u_i(x_0^*, y_i, x_{N \setminus i}^*) > u_i(x_0^*, x_i^*, x_{N \setminus i}^*)$ для $\forall j \in N$. Візьмемо коаліцію $N(k)$, до якої належить i -й гравець. Позначимо через $y_{N(k)} = (x_i, x_{N(k) \setminus i}^*)$. Звідси випливає, що $u_i(x_0^*, y_{N(k)}, x_{N \setminus N(k)}^*) > u_i(x^*)$, $\forall j \in N(k)$. Тоді отримаємо $x^* \notin BR_{KE(Q)}$, що суперечить початковому твердженню.

Оскільки $BR_{KE(Q)} = BR_{NE}$, коли кожен гравець являє собою окрему коаліцію $N(i) = \{i\}, i \in N$, то $BR_{NE} \subseteq BR_{IOE}$.

Нехай коаліція одна і включає в себе всіх підлеглих, тобто $|K|=1; N(k)=N, k \in K$. Тоді $BR_{KE(Q)} = BR_{PO}$ і тому $BR_{PO} \subseteq BR_{IOE}$. Теорему доведено.

Наслідок 1. Нехай множини стратегій гравців X_i - компактні, $i \in N$, а їх функції виграну $u_i(x_0, x_N), i \in N$, - неперервні по $x_N \in X_N$. Тоді $BR_{IOE} \neq \emptyset$.

Доведення наслідку безпосередньо випливає з твердження 3 оскільки на основі теореми 1 $BR_{IOE} \supseteq BR_{PO}$.

Розглянемо наступну теорему, яка допоможе конструктивно описати множину індивідуально-оптимальних рівноваг підлеглих при фіксованій стратегії лідера $x_0 \in X_0$.

Теорема 2. Нехай, без обмеження загальності, функції виграну гравців $u_i(x) > 0, \forall x \in X, i \in N$. Для кожної фіксованої стратегії $x_0 \in X_0$ лідера набір x_N^* буде індивідуально-оптимальною рівновагою підлеглих тоді й лише тоді, коли існують вектори параметрів: $m_i = (m_i^j)_{j \in N} \geq 0$,

$i \in N$, такі, що ситуація (x_0, x_N^*) буде задовольняти наступній системі нерівностей:

$$\min_{j \in N} (u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) - m_i^j) \leq \min_{j \in N} (u_j(x_0, x_N^*) - m_i^j), \quad (1)$$

$$\forall y_i \in X_i, i \in N.$$

Якщо набір x_N^* є індивідуально-оптимальною рівновагою підлеглих при фіксованій стратегії $x_0 \in X_0$ лідера, то ситуація (x_0, x_N^*) задовольняє системі нерівностей (1) зі значеннями векторів параметрів: $\bar{m}_i^j = u_j(x_0, x_N^*)$, $i, j \in N$.

Доведення. Доведемо достатність. Нехай ситуація (x_0, x_N^*) задовольняє системі нерівностей (1) при деяких значеннях векторів параметрів $m_i^j > 0$, $i \in N$. Звідси випливає, що для $\forall i \in N$ і $\forall y_i \in X_i$ мають місце нерівності:

$$\min_{j \in N} (u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) - m_i^j) \leq \min_{j \in N} (u_j(x_0, x_N^*) - m_i^j) \leq$$

$$\leq u_k(x_0, x_N^*) - m_i^k, \quad \forall k \in N, \quad \text{тому} \quad \forall i \in N$$

$$\forall y_i \in X_i \quad \text{існує} \quad j \in N, \quad \text{що}$$

$$u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) \leq u_j(x_0, x_N^*). \quad \text{Отже} \quad \forall i \in N$$

$$\neg \{y_i \in X_i : u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) > u_j(x_0, x_N^*) \text{ для } \forall j \in N.$$

Звідси $x_N^* \in IOE(x_0)$.

Доведемо необхідність. Для цього візьмемо вектори $\bar{m}_i = (\bar{m}_i^j)_{j \in N}$, $i \in N$ з компонентами:

$$m_i^j = u_j(x_0, x_N^*), \quad i, j \in N. \quad \text{Очевидно, що}$$

$$\bar{m}_i > 0, \quad i \in N. \quad \text{З того, що } x_N^* \in IOE(x_0) \text{ випливає,}$$

$$\text{що } \forall i \in N \quad \neg \{y_i \in X_i : u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) > u_j(x_0, x_N^*)$$

$$\text{для } \forall j \in N, \text{ тобто } \forall i \in N \quad \forall y_i \in X_i \quad \exists j \in N, \text{ що}$$

$$u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) \leq u_j(x_0, x_N^*), \quad \text{а значить}$$

$$u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) - \bar{m}_i^j \leq u_j(x_0, x_N^*) - \bar{m}_i^j. \quad \text{Оскільки}$$

$$u_j(x_0, x_N^*) - \bar{m}_i^j = u_j(x_0, x_N^*) - u_j(x_0, x_N^*) = 0, \quad \forall j \in N$$

$$\forall i \in N, \text{ то для } \forall y_i \in X_i \text{ справедливе}$$

$$\min_{j \in N} (u_j(x_0, y_i, x_{N \setminus i}^*) - \bar{m}_i^j) \leq 0 = \min_{j \in N} (u_j(x_0, x_N^*) - \bar{m}_i^j).$$

Тому ситуація (x_0, x_N^*) задовольняє нерівності (1). Теорему доведено.

Таким чином, теорема 2 дає можливість конструктивно описати множину індивідуально-оптимальних відповідей підлеглих BR_{IOE} (і відповідно множини BR_{NE} , $BR_{KE(Q)}$, BR_{FO}) як розв'язок системи нерівностей (1) за умовами: $m_i = (m_i^j)_{j \in N} \geq 0$, $i \in N$.

Теорема 3. Набір x_N^* буде індивідуально-оптимальною рівновагою підлеглих для фіксованої стратегії лідера $x_0 \in X_0$ у грі G тоді й лише тоді, коли $\forall x_i \in X_i \quad \forall i \in N$

$$\min_{j \in N} (u_j(x_0, x_i, x_{N \setminus i}^*) - u_j(x_0, x_N^*)) \leq 0. \quad (2)$$

Доведення. Доведемо необхідність. Нехай x_N^* буде індивідуально-оптимальною рівновагою підлеглих для фіксованої стратегії лідера $x_0 \in X_0$. Тоді за означенням звідси випливає, що для $\forall i \in N$, $\forall x_i \in X_i$ існує функція виграшу гравця $j \in N$ така, що $u_j(x_0, x_i, x_{N \setminus i}^*) \leq u_j(x_0, x_N^*)$, а значить $\min_{j \in N} (u_j(x_0, x_i, x_{N \setminus i}^*) - u_j(x_0, x_N^*)) \leq 0$. Таким чином, (x_0, x_N^*) задовольняє нерівностям (2).

Доведемо достатність. Нехай ситуація (x_0, x_N^*) задовольняє нерівностям (2). Тоді для будь-якого гравця $i \in N$ та будь-якої його стратегії $x_i \in X_i$ існує функція виграшу гравця $j \in N$, що $u_j(x_0, x_i, x_{N \setminus i}^*) \leq u_j(x_0, x_N^*)$. Отже, за означенням x_N^* буде індивідуально-оптимальною рівновагою підлеглих для фіксованої стратегії лідера $x_0 \in X_0$. Теорему доведено.

Слід відмітити, що система нерівностей (2) є не такою вже і простою, тому у випадку неперервно-диференційованих функцій виграшу гравців для практичного застосування може бути корисною наступна теорема.

Теорема 4. Нехай у грі G множини стратегій гравців є скалярними, а функції виграшу є неперервно-диференційованими в околі ситуації (x_0, x_N^*) . Тоді для того, щоб внутрішня точка x_N^* множини наборів стратегій підлеглих X_N була індивідуально-оптимальною рівновагою підлеглих для фіксованої стратегії лідера $x_0 \in X_0$, необхідно існування для кожного гравця $i \in N$ хоча б пари функцій виграшу гравців $j, k \in N$, $j \neq k$, для яких:

$$(du_j(x_0, x_N^*)/dx_i) \cdot (du_k(x_0, x_N^*)/dx_i) \leq 0. \quad (3)$$

Доведення. Нехай $x_N^* \in IOE(x_0)$. Позначимо ситуації: $x = (x_0, x_N)$, $x^* = (x_0, x_N^*)$. Розглянемо $v_i(x) = u_i(x^*) + (du_i(x^*)/dx_i)(x - x^*)$, $i \in N$, - лінеаризовані функції виграшу гравців в околі

ситуації $x^* = (x_0, x_N^*)$. Спочатку покажемо, що

$$\forall j \in N \quad \nexists \bar{x}_j \in X_j : v_j(x_0, \bar{x}_j, x_{N-j}^*) > v_j(x^*), j \in N. \quad (4)$$

Припустимо супротивне, що $\exists i \in N \quad \exists \bar{x}_i \in X_i : v_i(x_0, \bar{x}_i, x_{N-i}^*) > v_i(x^*)$. Тоді функція $v_i(x_0, \bar{x}_i, x_{N-i}^*) = u_i(x^*) + (du_i(x^*)/dx_i)(\bar{x}_i - x_i^*) > v_i(x^*) = u_i(x^*) + (du_i(x^*)/dx_i)(x_i^* - x_i^*)$, $j \in N$. Звідки виходить $(du_i(x^*)/dx_i)(\bar{x}_i - x_i^*) > 0$, $j \in N$. Таким чином, система нерівностей:

$$(du_i(x^*)/dx_i)x_i > 0, j \in N, \quad (5)$$

є сумісною. За припущенням неперервної диференційованості функцій виграшу гравців у ситуації x^* запишемо для вихідної гри G лінійні частини розкладів у ряд Тейлора $u_j(x)$ за стратегіями кожного гравця $j \in N$ окремо в $\varepsilon > 0$ -околі, ситуації x^* . Тоді вірні рівності: $u_j(x_0, x_i^* + \varepsilon x_{N-j}^*) = u_j(x^*) + \varepsilon (du_j(x^*)/dx_i)x_i + o(\varepsilon)$, $j \in N$. З рахунком сумісності системи нерівностей (5) одержимо нерівності: $u_j(x_0, x_i^* + \varepsilon x_{N-j}^*) > u_j(x^*)$, $j \in N$. Оскільки x_N^* є внутрішньою точкою множини наборів стратегій підлеглих X_N , то цілком зрозуміло, що і ситуація $(x_0, x_i^* + \varepsilon x_{N-j}^*) \in X$. Таким чином, існує такий гравець $i \in N$, для якого $(x_0, x_i^* + \varepsilon x_{N-j}^*) \gg x^*$. Тому $x_N^* \notin IOE(x_0)$. Одержана суперечність і доводить умову (4).

З умови (4) очевидно випливає, що для

$$\forall i \in N \quad \nexists \bar{x}_i \in X_i : v_i(x_0, \bar{x}_i, x_{N-i}^*) = u_i(x^*) + (du_i(x^*)/dx_i)(\bar{x}_i - x_i^*) > v_i(x^*) = u_i(x^*) + (du_i(x^*)/dx_i)(x_i^* - x_i^*), j \in N.$$

Звідки виходить, що для $\forall i \in N$, $\nexists \bar{x}_i \in X_i : (du_i(x^*)/dx_i)(\bar{x}_i - x_i^*) > 0$, $j \in N$. Таким чином, система нерівностей (5) є несумісною.

Припустимо супротивне (3), що для деякого $i \in N \quad (du_i(x^*)/dx_i) \cdot (du_k(x^*)/dx_i) > 0$, $\forall j, k \in N$. Тоді або $(du_i(x^*)/dx_i) > 0$, $\forall j \in N$, або $(du_i(x^*)/dx_i) < 0$, $\forall j \in N$. У першому випадку, система нерівностей (5) буде сумісною при $\forall \lambda_j > 0$ і ми одержимо суперечність. У другому випадку, система нерівностей (5) буде сумісною

при $\forall \lambda_j < 0$ і ми також одержимо суперечність. Теорему доведено.

Індивідуально-оптимальна поведінка підлеглих узагальнює (у сенсі теореми 1) рівновагу за Нешем, коаліційну і оптимальну за Парето поведінку і дає можливість зробити наступні висновки.

Безумовно, оптимальна за Парето поведінка підлеглих, є найкращою для них, оскільки для будь-якої фіксованої стратегії лідера не існує кращого для всіх підлеглих набору їх стратегій. Але така поведінка буде обґрунтована лише у випадку наявності спільної цілі у всіх підлеглих і колективного або кооперативного сценарію їх поведінки. У випадку некооперативних відносин між підлеглими, найкращою для підлеглих буде індивідуально оптимальна поведінка, яка також буде обґрунтована лише у випадку наявності спільної цілі у всіх підлеглих. Це пояснюється тим, що кожному підлеглому окремо буде невигідно змінювати свою стратегію, оскільки виграш всіх підлеглих строго не покращиться.

З точки зору лідера, рівновага за Нешем, коаліційна і оптимальна за Парето поведінка підлеглих апріорі не порівнювані для нього, але в силу теореми 1 їх індивідуально-оптимальна поведінка гарантовано дасть йому кращий (не строго) виграш. Таким чином, якщо у лідера є можливість впливати на вибір підлеглими сценарію своїх взаємовідносин, то йому будуть вигідні некооперативні відносини підлеглих, що мають спільну ціль.

Таким чином, і лідеру і підлеглим вигідно, коли підлегли взаємно інформовані і мають спільну ціль. Лідеру вигідна некооперативна поведінка підлеглих. Підлеглим же вигідні колективні і кооперативні взаємовідносини.

Список використаних джерел

1. *Мащенко С.О.* Исследование стабильности равновесий на основе принципа индивидуальной оптимальности // Кибернетика и системный анализ. - 2007. - № 4. - С. 162-169.
2. *Мащенко С.О.* Слабкі індивідуально-оптимальні рівноваги // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. - 2006. - 2. - С. 216-223.
3. *Мулен Э.* Теория игр с примерами из математической экономики. - М.: Мир, 1985. - 200 с.

Надійшла до редколегії 16.09.10

УДК 519.9

Потієнко М.В., асп.

Структурна модель процесів короткотривалої пам'яті людини

Кора головного мозку відповідає за функцію короткотривалої пам'яті людини, що є однією з найважливіших частин усієї пам'яті. Вона представляє собою ієрархічну систему нейронних мереж – кортикальних колонок. В даній роботі описана структура такої системи та структура кортикальної колонки, яка є ієрархічною нейронною мережею, залежною від трьох вільних змінних.

Ключові слова: нейронні мережі, пам'ять, кортикальна колонка.

*E-mail: dmelk@ukr.net

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Хусайнов Д.Я.

Розвиток технологій надає можливість моделювати все складніші процеси, що відбуваються у світі. До таких процесів відносяться і ті, які проходять у тілі людини. Так на одне з перших місць виходить задача моделювання роботи людського мозку, а особливо – пам'яті: процесів навчання, запам'ятовування, розпізнавання, тощо. Побудова математичної та комп'ютерної моделі пам'яті дає змогу зрозуміти як проходять такі процеси, як людина мислить, наблизитись до розуміння людського інтелекту.

Дослідження в області людської пам'яті проходять в різних напрямках науки. Тому для розв'язку таких задач доцільно використовувати міждисциплінарний підхід. Він полягає у синтезі результатів досліджень пам'яті та процесів, що в ній відбуваються, різних наук, не тільки природничих, а і гуманітарних.

Для розуміння глобальної структури пам'яті треба скористатися результатами психологічних та фізіологічних досліджень. Так результати досліджень психологів показують, що пам'ять ділиться на три компоненти: короткотривалу та довготривалу, що складається з епізодичної та семантичної [1,2].

Як відомо з фізіології за процеси пам'яті у мозку відповідають наступні елементи: кора головного мозку, гіпокамп, таламус [1]. Кожен з цих елементів можна прив'язати до компонентів пам'яті з точки зору психологів. Так більшою мірою кора головного мозку представляє собою

M.V. Potienko, postgraduate student

Structural model of processes in human short term memory

Cortex is responsible for human short term memory's function, which is one of the most important parts of the entire memory. It is a hierarchical system of neural networks made from cortical columns. This paper describes the structure of this system and structure of cortical column, which is also hierarchical neural network depending on three free variables.

Key Words: neural networks, memory, cortical column.

короткотривалу пам'ять, хоча її зв'язки несуть в собі також і частину семантичної пам'яті. Гіпокамп є епізодичною пам'яттю, в той час як таламус – семантичною.

Усі ці три елементи поєднані між собою. Кора оброблює інформацію та передає її в таламус і гіпокамп, а також отримує дані від цих елементів. Крім цього гіпокамп і таламус поєднані між собою: інформація передається з епізодичної пам'яті в семантичну, та навпаки.

Головним елементом, що приймає роль у процесах пам'яті є кора головного мозку. Вона використовується у всіх процесах: навчанні, запам'ятовуванні, розпізнаванні інформації.

Кора головного мозку представляє собою ієрархічну систему нейронних мереж – кортикальних колонок [1,3]. Завдяки такій структурі людина може будувати представлення про складні об'єкти. Кожен об'єкт у пам'яті зберігається у вигляді послідовності характеристик. Але характеристики також можуть бути об'єктами. Таким чином представлення про об'єкт в пам'яті – це послідовність послідовностей [4,5]. Ієрархічна структура дозволяє зберігати такі структури.

В залежності від складності об'єкту для його запам'ятовування або розпізнавання потрібно задіяти колонки з різних рівнів ієрархії. Так найпростіші об'єкти, що представляються невеликою послідовністю характеристик, або лише однією характеристикою, задіюють колонки найнижчих рівнів в ієрархії. Чим складніший

об'єкт, на чим більшому рівні абстракції він знаходиться – тим вищого рівня колонки потрібні для того щоб його запам'ятати або впізнати.

Ієрархічність структури кори головного мозку полягає в тому, що кожна колонка знаходиться на одному з рівнів ієрархії, і пов'язана лише з колонками нижчого та вищого рівнів та з нейронами в гіпокампі та таламусі.

Крім того кортикальна колонка також є ієрархічною нейронною мережею. Вона складається з шести рівнів ієрархії, на кожному з яких знаходяться нейрони. Але нейрони кожного рівня пов'язані майже зі всіма іншими ієрархічними рівнями колонки, а в деяких випадках і з нейронами свого рівня [3,6].

Буде доцільним вертикально впорядкувати та пронумерувати рівні ієрархії кожної колонки. Для цього нумерацію рівнів в окремій колонці слід робити зверху вниз. Так найвищий перший рівень ієрархії буде найближчим до тих колонок, що знаходяться на вищому рівні ієрархії, у той час як найнижчий шостий – до тих, що знаходяться на нижчому рівні.

Відповідно до такого впорядкування та нумерації синапси в колонці треба розглядати в залежності від напрямку передачі сигналу: прямого – від нижчих рівнів ієрархії до вищих, – та оберненого – навпаки.

Спочтау розглянемо синапси прямої передачі. Для цього треба розглянути зовнішні синапси колонки, по яким приходить сигнал від колонок нижчого рівня ієрархії або інших елементів мозку: таламуса та гіпокампа.

Синапси, що приходить від колонок нижчого рівня ієрархії ведуть до нейронів четвертого рівня. Саме на ці нейрони поступає повністю необроблена інформація з інших кортикальних колонок. Нейрони четвертого рівня мають синапси прямої передачі, що ведуть до нейронів другого та третього рівнів.

Особливістю нейронів третього рівня є те, що всі вони представляються парою нейронів – корзинчатим та звичайним. Звичайний нейрон просто передає сигнал на колонки, що знаходяться вище в ієрархії. У той же час, корзинчатий нейрон активується лише якщо вся колонка може розпізнати вхідну інформацію. Коли він активується – то посилає інгібіторний сигнал до звичайного нейрона в своїй парі, забираючи у нього можливість активуватися.

Нейрони другого рівня в свою чергу активуються лише коли інформація розпізнана, і також передають данні до колонок вищого рівня ієрархії.

Крім цього нейрони другого і третього рівня пов'язані з нейронами першого рівня. Цей рівень ієрархії відрізняється від інших тим, що має найменшу кількість нейронів. У той же час всі його нейрони мають синапси, що зв'язують їх між собою.

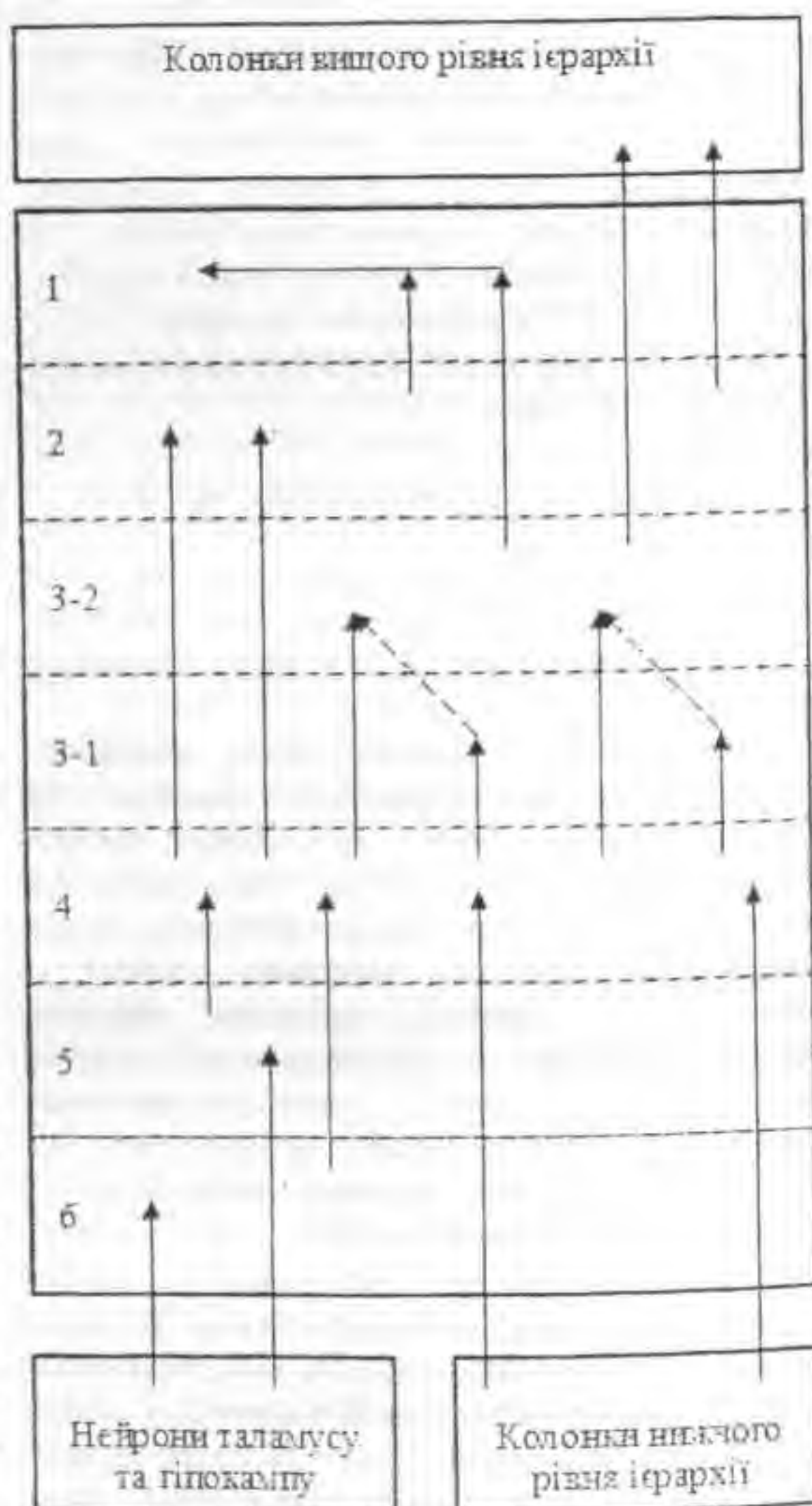


Рис. 1 Прямая передача сигналу в колонці.

Як було зазначено вище колонка також отримує данні від нейронів таламусу і гіпокампу [4]. Синапси від цих нейронів ведуть до нейронів п'ятого та шостого рівнів в колонці. Від них інформація по синапсам прямої передачі потрапляє на нейрони четвертого рівня (Рис. 1).

Структура синапсів оберненої передачі є більш складною. Аналогічно до того, як розглядалась структура синапсів прямої передачі, треба розглядати синапси, по яким в колонку приходить сигнал від колонок вищого рівня ієрархії. Такі синапси ведуть до нейронів першого

рівня. Ці нейрони пов'язані з нейронами усіх рівнів ієрархії, крім четвертого.

Нейрони другого та третього рівнів ієрархії зв'язані з нейронами шостого рівня. Для нейронів третього рівня діє такий самий принцип при оберненій передачі даних, як і при прямій. Тобто або активується корзинчатий нейрон, і не активується його парний нейрон, або навпаки. Треба відмітити, що коли активується нейрон другого рівня, відповідно до цього активується і корзинчатий нейрон третього рівня.

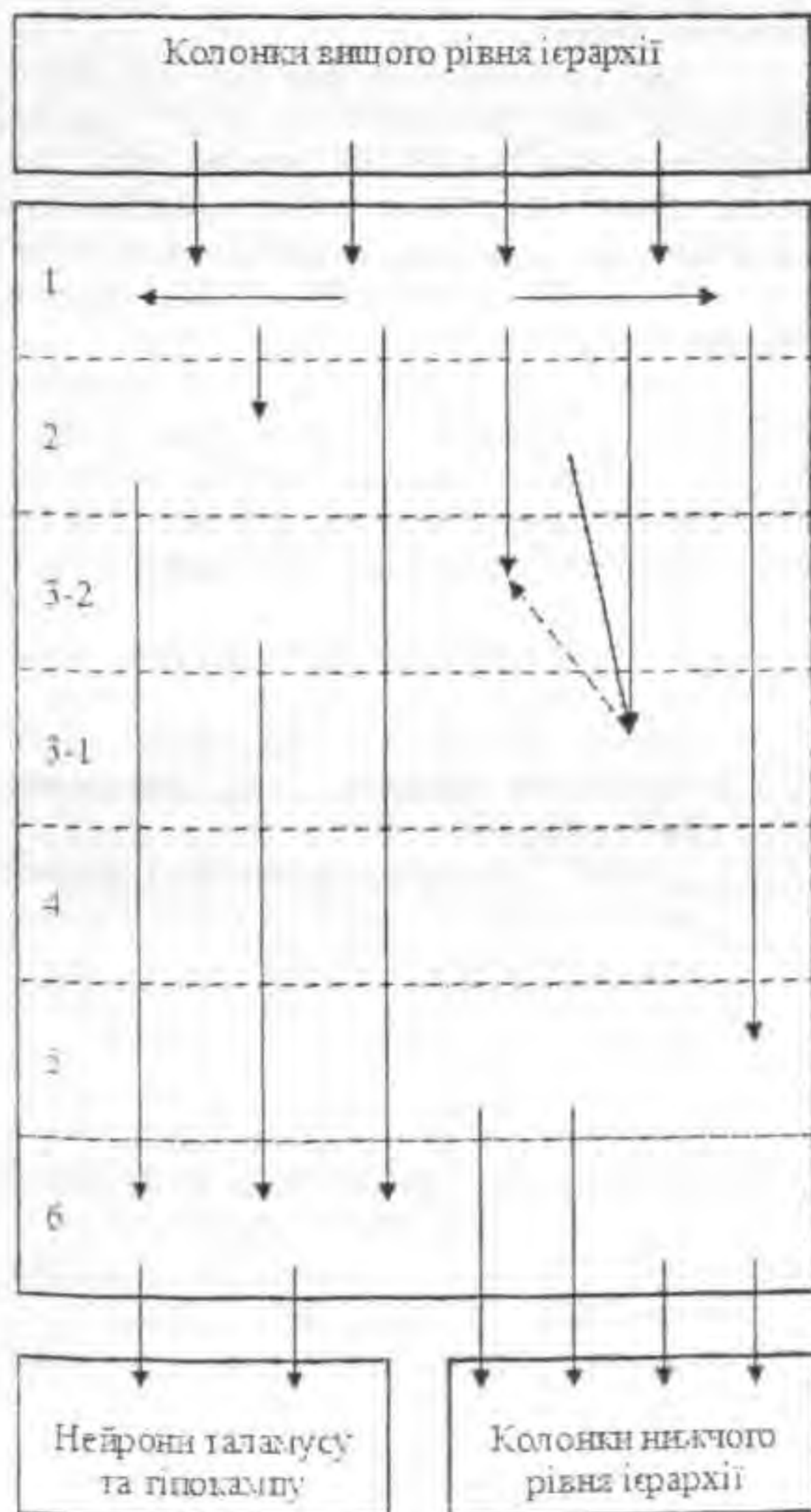


Рис. 2. Обернена передача сигналу в колонці.

Виходячи з цього можна вважати, що нейрони другого рівня відповідають саме за розпізнання даних, у той час як нейрони третього рівня – за невідому інформацію. Так колонка або передає наверх інформацію про вже відомий об'єкт, або просто передає нерозпізнану характеристику. Відповідно колонка або отримує

підказку зверху про те, що це може бути за об'єкт чи характеристика, або отримує підказку про наступні можливі об'єкти [3,4,6].

Синапси оберненої передачі сигналу нейронів другого та третього рівня ідуть на шостий рівень. Нейрони цього рівня передають сигнал до нейронів гіпокампу і таламусу. Завдяки цьому реалізується обернений зв'язок між головними елементами пам'яті людини.

Також, разом з нейронами п'ятого рівня, нейрони шостого рівня передають сигнал іншим колонкам, що знаходяться на нижчому рівні ієрархії (Рис. 2).

Але не тільки нейрони першого рівня пов'язані між собою. Нейрони кожного рівня крім четвертого мають синапси, що пов'язують їх з деякими нейронами свого рівня.

Кількість нейронів на четвертому рівні – N , – відповідає кількості характеристик, які може отримати колонка з зовнішніх джерел: колонок нижчого рівня ієрархії, гіпокампу і таламусу.

Нейрони першого рівня відповідають за запам'ятовані об'єкти, тобто послідовності характеристик. Для кожної підпослідовності такої послідовності колонка може визначити ймовірну наступну характеристику. Тому кількість нейронів першого рівня K , відповідає кількості можливих об'єктів, що може запам'ятати дана колонка. Всі нейрони першого рівня пов'язані між собою.

Кількість нейронів на другому рівні та кількість пар нейронів на третьому буде однаковою – KN . Так кожен нейрон четвертого рівня пов'язаний з групою із K і $2K$ нейронів другого та третього рівнів відповідно. Кожен нейрон другого рівня та кожна пара нейронів третього рівня з групи має синапс прямої передачі, який веде до окремого нейрона першого рівня. Тобто кожен нейрон (пара нейронів) i ($i = \overline{1, K}$) з групи j ($j = \overline{1, N}$) має синапс, що веде до нейрона i першого рівня, та має вхідний синапс від нейрона j четвертого рівня.

Також кожен нейрон першого рівня має синапси оберненої передачі з групою із N і $2N$ нейронів другого та третього рівнів відповідно.

Нейрони другого та третього рівнів, які входять до кожної з описаних вище груп пов'язані між собою.

Нейрони п'ятого та шостого рівнів відповідають за зв'язок колонки з колонками нижчого рівня ієрархії, а також з нейронами з гіпокампу та таламусу. Кількість цих нейронів буде MKN , де M – вільна змінна, що відповідає за кількість колонок нижчого рівня ієрархії та

кількість нейронів в гіпокампі та таламусі, з якими пов'язана колонка.

Нейрони цих рівнів також можна розбити на наступні групи.

Група з MK нейронів, що має синапси прямої передачі з нейронами четвертого рівня. Загалом це єдині синапси прямої передачі, які мають нейрони п'ятого та шостого рівнів.

Нейрони першого рівня мають синапси оберненої передачі що ведуть до груп з MN нейронів на п'ятому та шостому рівнях.

Крім того нейрони другого та третього рівня також пов'язані з групою з M нейронів на п'ятому та шостому рівні.

Також можна ще виділити M груп, що складаються з KV нейронів. Нейрони цих груп мають синапси, які ведуть до нейронів колонок нижчого рівня ієрархії, гіпокампу і таламусу.

Нейрони кожної з описаних вище груп, так само як і в випадку з нейронами другого та третього рівнів поєднані між собою.

Але кора головного мозку не тільки обробляє вхідні данні, незалежно від того, звідки вони потрапляють: з інших частин мозку відповідальних за інформацію про зовнішній світ, отриману органами чуття людини, або з довготривалої пам'яті – таламусу та гіпокампу. Вона сама є частиною довготривалої пам'яті [2].

Колонки нейронів навчаються під час обробки інформації – змінюються пропуски можливості синапсів. Таким чином навіть без зв'язку з гіпокампом або таламусом, кора головного мозку може реагувати на деякі прості ситуації.

Описана структура є результатом використання міждисциплінарного підходу.

Так можна стверджувати, що людська пам'ять ділиться на дві частини: короткотривалу та довготривалу, яка представляє собою епізодичну та семантичну пам'ять. Кожен з цих видів пам'яті представляє собою окрему частину мозку людини: кору головного мозку, гіпокамп і таламус відповідно [1,2].

Найбільший інтерес представляє саме короткотривала пам'ять – кора головного мозку, оскільки вона оброблює всю інформацію, що отримусь людина, незалежно від її джерела – зовнішнього світу або уяви. Вона представляє собою ієрархічну систему нейронних мереж – кортикальних колонок [1,3-5].

Кожна з колонок знаходиться на одному рівні ієрархії, та пов'язана лише з колонками вищого або нижчого рівня, та зовнішніми елементами пам'яті: таламусом і гіпокампом, і, можливо, іншими елементами мозку.

В свою чергу кортикальна колонка є також ієрархічною нейронною мережею. Вона складається з шести рівнів ієрархії. В колонках існують не тільки міжієрархічні зв'язки, але і зв'язки між нейронами одного рівня [3,6]. Структура кожної колонки може бути описна за допомогою трьох вільних змінних – M , K , і N де: M – кількість зв'язків колонки з колонками нижчого рівня ієрархії та нейронів гіпокампу і таламусу, K – кількість об'єктів, яку може запам'ятати колонка, N – кількість характеристик, які колонка може отримати з зовнішніх джерел.

Таке представлення про кору головного мозку дає змогу зрозуміти та описати процес запам'ятовування інформації про об'єкти. Так кожен об'єкт представляє собою послідовність характеристик, де кожна характеристика також може бути об'єктом, тобто послідовність послідовностей.

Знання структури дозволяє побудувати математичну, а потім і комп'ютерну модель людської пам'яті, та досліджувати її роботу. Ці дослідження можуть дати краще представлення про людську пам'ять, мислення та інтелект.

Список використаних джерел

1. Покровський В.М., Коротько Г.Ф. Физиология человека. – М.: Медицина, 2007. – 816 с.
2. Corkin S. Lasting consequences of bilateral medial temporal lobectomy: Clinical course and experimental findings in h. m. // Seminars in Neurology. – 1984. – 4. – P.249-259
3. Хоккинс Дж., Блейкли С. Об интелекте. – М.: Вильямс, 2004. – 240 с.
4. Эдельман Дж, Маунткастл В. Разумный мозг. – М.: Мир, 1981. – 135 с.
5. Роуз С. Устройство памяти. От молекул к созанию. – М.: Мир, 1995. – 384 с.
6. Хьюббел Д. Глаз, мозг, зрение. – М.: Мир, 1990. – 240 с.

Надійшла до редколегії 20.09.2010

УДК 517.5

Савкіна М.Ю., к. ф.-м. н.

L_1 -оцінка параметрів моделі
нелінійної сплайнової регресії

Запропоновано алгоритм побудови L_1 -оцінки параметрів моделі нелінійної сплайнової регресії, де функція регресії - лінійний сплайн на відрізку $[0,1]$ з одним вузлом. Розташування вузла невідоме та підлягає оцінюванню.

Ключові слова: робастна оцінка, метод найменших абсолютних відхилень, лінійний сплайн

E-mail:marta@imath.kiev.ua

Статтю представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Розглянемо регресійну модель у загальному вигляді

$$y_i = f(x_{i1}, \dots, x_{ik}, \alpha_1, \dots, \alpha_m) + \xi_i, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

де $y_0, \dots, y_n$ - значення, які є $n + 1$ спостереженнями випадкової величини y , $x_{i1}, \dots, x_{ik}$ - незалежні змінні, які відповідають i -тому спостереженню, $(\alpha_1, \dots, \alpha_m)^T = \vec{\alpha}$ - вектор невідомих параметрів, який підлягає оцінюванню, $\xi_0, \dots, \xi_n$ - незалежні у сукупності випадкові величини з $E\xi_i = 0$ та $D\xi_i = \sigma^2$.

Найбільш поширеним методом оцінювання невідомих параметрів в регресійному аналізі (як лінійному, так і нелінійному) є метод найменших квадратів (МНК), який полягає в мінімізації суми

$$\sum_{i=0}^n \xi_i^2$$

відносно вектора $\vec{\alpha}$. Оцінка параметрів МНК $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ в лінійному випадку знаходиться як розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь.

Але в деяких випадках слід віддати перевагу іншому методу оцінювання невідомих параметрів - методу найменших абсолютних відхилень, який мінімізує суму

M.Yu.Savkina, cand. ph.-math. science

L_1 -estimation of parameters of nonlinear spline regression model

The algorithm of construction L_1 -estimation of parameters of nonlinear spline regression model is suggested, where function of regression is linear spline on segment $[0,1]$ with one knot point. The location of knot points isn't known and to be estimated.

Key Words: robust estimation, method of least absolute deviations, linear spline

$$\sum_{i=0}^n |\xi_i|$$

відносно вектора $\vec{\alpha}$.

Річ у тому, що статистичні висновки лише частково ґрунтуються на спостереженнях. Таку ж важливу основу цих висновків складають початкові припущення про досліджувану ситуацію. Від цих припущень не вимагається абсолютної точності: вони є математично обґрунтованими наближеннями, що відповідають часто не цілком точним званням або уявленням. При оцінці обґрунтованості застосування таких наближень опираються на принцип свого роду неперервності або стійкості: мала похибка в математичній моделі не повинна викликати істотну похибку остаточних результатів.

Метод найменших квадратів, який є оптимальним в припущенні про нормальність розподілу ξ_i , $i = 0, 1, \dots, n$, вельми чутливий до досить малих відхилень від припущень[1]. Оцінка невідомих параметрів моделі, що отримана за методом найменших абсолютних відхилень (в статистиці вона ще називається L_1 -оцінкою), є робастною, тобто слабчутливою до невеликих змін початкових припущень.

У випадку, коли функція регресії є лінійною відносно параметрів $\alpha_1, \dots, \alpha_m$, мінімізація суми абсолютних відхилень зводиться до задачі лінійного програмування [2]. Розв'язування її набагато спроститься, якщо перейти до двоїстої задачі лінійного програмування. Таким чином, при знаходженні L_1 -оцінок параметрів регресії можна скористатися стандартними програмами лінійного програмування. В роботі [3] L_1 -оцінку цих параметрів знайдено за допомогою алгоритма, заснованому на тому, що така регресія проходить через $m+1$ точку виборки $(y_i, x_{i1}, \dots, x_{im})$, $i = 0, 1, \dots, n$.

В роботі [4] запропоновано простий метод мінімізації суми абсолютних відхилень, що спирається на звичайний МНК. Цей метод отримав назву "ітеративного МНК". Ідея його полягає в наступному. Суму абсолютних відхилень подамо у вигляді

$$\sum_{i=0}^n |\xi_i| = \sum_{i=0}^n \xi_i^2 \cdot \frac{1}{|\xi_i|} = \sum_{i=0}^n \xi_i^2 \cdot w_i,$$

На нульовій ітерації покладемо

$$w_i^{(0)} = 1, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

тобто на цій ітерації оцінка ітеративного МНК $(\alpha_1^{(0)}, \dots, \alpha_m^{(0)})$ співпадає з оцінкою звичайного МНК. Надалі

$$w_i^{(k+1)} = |y_i - \alpha_1^{(k)} x_{i1} - \dots - \alpha_m^{(k)} x_{im}|^{-1},$$

$$i = 0, 1, \dots, n,$$

тобто ваги w_i оцінюються на підставі параметрів, отриманих на попередній ітерації. В роботі [5] доведено збіжність ітеративного МНК; автори називають цей метод методом варіаційно-зважених квадратичних наближень.

В роботі [6] доведено незсуненість L_1 -оцінки параметрів регресії за умовою регулярності на розподіл вектора відхилень. Умова регулярності для L_1 -оцінок співпадає з умовою $E\xi_i = 0$, $i = 0, 1, \dots, n$.

Розглянемо випадок, коли функція регресії має вигляд

$$f(x, a_1, b_1, a_2, b_2, x^*) =$$

$$= \begin{cases} a_1 x + b_1, & \text{якщо } 0 \leq x \leq x^*, \\ a_2 x + b_2, & \text{якщо } x^* \leq x \leq 1, \\ a_1 x^* + b_1 = a_2 x^* + b_2, \end{cases} \quad (1)$$

тобто функція $f(x, a_1, b_1, a_2, b_2, x^*)$ – це дві прямі, які перетинаються в точці x^* .

Якщо розташування точки x^* відоме, регресійна модель (1) буде лінійною відносно невідомих параметрів a_1, b_1, a_2, b_2 ; якщо розташування точки x^* невідоме, то модель (1) стає нелінійною, а x^* – невідомим параметром, який теж підлягає оцінюванню.

В роботі [7] наведено алгоритм побудови оцінки МНК невідомих параметрів такої регресії за скінченну кількість кроків.

Принципи побудови лінійних моделей детально розроблено. Але за їх допомогою неможливо описати багато складних систем, нелінійних за своєю природою; спроба їх використання у вигляді апроксимаційних залежностей нерідко призводить до того, що побудована модель містить велику кількість параметрів, громіздка та незручна в обігу. Нелінійні моделі більш гнучкі та навіть при невеликій кількості параметрів дозволяють досягти гарної згоди експериментальних та розрахункових даних.

Іноді буває зручніше функцію (1) подати у вигляді

$$f(x, a, b, c_1, x^*) = (a * x + b) + c_1 (x - x^*)_+, \quad (1')$$

де $(x - x^*)_+$ – зрізана степенева функція [8]:

$$(x - x^*)_+ = \begin{cases} 0, & \text{якщо } 0 \leq x \leq x^*, \\ x - x^*, & \text{якщо } x^* \leq x \leq 1, \end{cases}$$

В цих позначеннях a, b, c_1, x^* – невідомі параметри, які слід оцінювати; з параметрами a_1, b_1, a_2, b_2 вони пов'язані співвідношеннями

$$a = a_1; \quad b = b_1; \quad c_1 = a_2 - a_1.$$

В цій роботі побудовано алгоритм, згідно якому можна знайти L_1 -оцінку параметрів a, b, c_1, x^* регресії (1) за скінченну кількість кроків.

Спочатку наведемо алгоритм побудови L_1 -оцінки параметрів одновимірної регресії

$$y_i = a * x_i + b + \xi_i, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

з роботи [2]. Для цього треба зазначити лише

дві оптимальні точки - (x_k, y_k) і (x_m, y_m) з $n+1$ заданої точки.

Припустимо, шукана пряма проходить через останню точку (x_n, y_n) . Тоді один з двох параметрів прямої визначається співвідношенням $b = y_n - a * x_n$, а другий параметр a - як точка мінімуму опуклої вниз кусково-лінійної функції

$$\Delta(a) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n |y_i - y_n - a(x_i - x_n)| = \\ = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n |\tilde{y}_i - a\tilde{x}_i|.$$

Легко бачити, що мінімум $\Delta(a)$ досягається в одній з абсцис її зламу

$$a_i = \frac{\tilde{y}_i}{\tilde{x}_i}.$$

Шукане значення (наприклад, a_r) має ту особливість, що кутовий коефіцієнт ланки ламаної $\Delta(a)$ лівіше або правіше a_r має мінімальне значення порівняно з кутовими коефіцієнтами інших ланок. Це дозволяє вказати простий спосіб визначення a_r . Якщо упорядкувати a_i за збільшенням, то кутовий коефіцієнт ланки ламаної $\Delta(a)$ лівіше a_r визначається як

$$\sum_{j=0}^{r-1} |\tilde{x}_j| - \sum_{j=r}^n |\tilde{x}_j|,$$

а правіше a_r як

$$\sum_{j=0}^r |\tilde{x}_j| - \sum_{j=r+1}^n |\tilde{x}_j|, \quad (2)$$

причому доданки пронумеровані в порядку зростання a_j , тому мінімальне за абсолютною величиною значення знакозмінної суми (2) визначає шукане a_r . Якщо мінімум додатний, то це a_r , якщо від'ємний, то це a_{r+1} , якщо рівний 0, то завдання допускає безліч розв'язків. Визначивши точку (x_r, y_r) як кращу в парі (x_n, y_n) , відмовляємося від (x_n, y_n) і знаходимо кращу в парі до (x_r, y_r) за тими ж правилами, поки чергова краща точка не співпадатиме з тією, від якої відмовляємося, що дає остаточну оптимальну пару точок.

Перейдемо тепер до побудови L_1 -оцінки

параметрів регресії, функція якої має вигляд (1).

Алгоритм побудови оцінки $\hat{x}^*$ параметра x^* регресії (1).

Візьмемо ціле $k : 1 \leq k \leq n-1$, та відрізок $[x_k, x_{k+1}]$ співставимо точку $\hat{x}_k^*$ та число $T(k)$ наступним чином.

Крок 1. Розіб'ємо точки $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ на дві множини $D_k^{(1)} = (x_0, y_0), \dots, (x_k, y_k)$ та $D_k^{(2)} = (x_{k+1}, y_{k+1}), \dots, (x_n, y_n)$.

Будуємо методом найменших абсолютних відхилень дві прямі: одну по точкам з множини $D_k^{(1)}$, іншу по точкам з множини $D_k^{(2)}$. Нехай це будуть $a_1^{(k)}x + b_1^{(k)}$ та $a_2^{(k)}x + b_2^{(k)}$. Точку перетину цих прямих позначимо x_k^* ; якщо $x_k^* \in [x_k, x_{k+1}]$, то покладемо

$$T(k) = \rho_1(k) + \rho_2(k),$$

де

$$\rho_1(k) = \sum_{i=0}^k |y_i - a_1^{(k)}x_i - b_1^{(k)}|,$$

$$\rho_2(k) = \sum_{i=k+1}^n |y_i - a_2^{(k)}x_i - b_2^{(k)}|;$$

$$\hat{x}_k^* = x_k^*;$$

$$\hat{a}_1^{(k)} = a_1^{(k)}; \quad \hat{a}_2^{(k)} = a_2^{(k)}; \\ \hat{b}_1^{(k)} = b_1^{(k)}; \quad \hat{b}_2^{(k)} = b_2^{(k)}.$$

Якщо $x_k^* \notin [x_k, x_{k+1}]$, то перейдемо до кроків 2 та 3.

Крок 2. Візьмемо дві точки з множини $D_k^{(1)}$ (нехай це будуть (x_r, y_r) та (x_j, y_j) , $0 \leq r \leq k$, $0 \leq j \leq k$, $r \neq j$) та проведемо через них пряму (позначимо її $a_{rj}^{(1)}x + b_{rj}^{(1)}$).

З множини $D_k^{(2)}$ візьмемо точку (x_l, y_l) , $k+2 \leq l \leq n$. Будуємо пряму, яка проходить через точки $(x_k, a_{rj}^{(1)}x_k + b_{rj}^{(1)})$ та (x_l, y_l) (позначимо її $a_{kl}^{(1)}x + b_{kl}^{(1)}$); покладемо

$$x_{kl}^{(1)} = x_k;$$

$$T^{(1)}(kl) = \rho_{rj}^{(1)}(k) + \rho_{kl}^{(1)}(k),$$

де

$$\rho_{rj}^{(1)}(k) = \sum_{i=0}^k |y_i - a_{rj}^{(1)}x_i - b_{rj}^{(1)}|,$$

$$\rho_{kl}^{(1)}(k) = \sum_{i=k+1}^n |y_i - a_{kl}^{(1)}x_i - b_{kl}^{(1)}|.$$

Далі, будуюмо пряму, яка проходить через точки $(x_{k+1}, a_{rj}^{(1)}x_{k+1} + b_{rj}^{(1)})$ та (x_l, y_l) (позначимо її $a_{k+1,l}^{(1)}x + b_{k+1,l}^{(1)}$); покладемо

$$x_{k+1,l}^{(1)} = x_{k+1};$$

$$T^{(1)}(k+1, l) = \rho_{rj}^{(1)}(k) + \rho_{k+1,l}^{(1)}(k),$$

де

$$\rho_{k+1,l}^{(1)}(k) = \sum_{i=k+1}^n |y_i - a_{k+1,l}^{(1)}x_i - b_{k+1,l}^{(1)}|.$$

Якщо серед точок $(x_{k+1}, y_{k+1}), \dots, (x_{l-1}, y_{l-1}) \in$ такі, що

$$a_{kl}^{(1)}x_i + b_{kl}^{(1)} \leq y_i \leq a_{k+1,l}^{(1)}x_i + b_{k+1,l}^{(1)}$$

або

$$a_{k+1,l}^{(1)}x_i + b_{k+1,l}^{(1)} \leq y_i \leq a_{kl}^{(1)}x_i + b_{kl}^{(1)}$$

(нехай це будуть точки $(x_{m_1}, y_{m_1}), \dots, (x_{m_l}, y_{m_l})$), то будуюмо по черзі прямі, які проходять через точки (x_{m_i}, y_{m_i}) та (x_l, y_l) (позначимо їх $a_{m_i,l}^{(1)}x + b_{m_i,l}^{(1)}$); обчислюємо

$$T^{(1)}(m_i, l) = \rho_{rj}^{(1)}(k) + \rho_{m_i,l}^{(1)}(k),$$

де

$$\rho_{m_i,l}^{(1)}(k) = \sum_{i=k+1}^n |y_i - a_{m_i,l}^{(1)}x_i - b_{m_i,l}^{(1)}|.$$

Абсцису точки перетину прямих $a_{rj}^{(1)}x + b_{rj}^{(1)}$ та $a_{m_i,l}^{(1)}x + b_{m_i,l}^{(1)}$ позначимо $x_{m_i,l}^{(1)}$.

Покладемо

$$T_{1,l}^{(rj)}(k) = \min\{T^{(1)}(kl), T^{(1)}(k+1, l),$$

$$T^{(1)}(m_1, l), \dots, T^{(1)}(m_s, l)\}.$$

Позначимо через $x_{1,l}^{(rj)}$ ту точку з множини

$$X_{1,l}^{(rj)} = \{x_{k,l}^{(1)}, x_{k+1,l}^{(1)}, x_{m_1,l}^{(1)}, \dots, x_{m_l,l}^{(1)}\},$$

яка відповідає мінімальному з $T^{(1)}(kl), T^{(1)}(k+1, l), T^{(1)}(m_1, l), \dots, T^{(1)}(m_l, l)$.

Нарешті, будуюмо пряму, яка проходить через точки $(x_k, a_{rj}^{(1)}x_k + b_{rj}^{(1)})$ та (x_{k+1}, y_{k+1})

(позначимо її $a_{k,k+1}^{(1)}x + b_{k,k+1}^{(1)}$); покладемо

$$x_{1,k+1}^{(rj)} = x_k;$$

$$T_{1,k+1}^{(rj)}(k) = \rho_{rj}^{(1)}(k) + \rho_{k,k+1}^{(1)}(k),$$

де

$$\rho_{k,k+1}^{(1)}(k) = \sum_{i=k+1}^n |y_i - a_{k,k+1}^{(1)}x_i - b_{k,k+1}^{(1)}|.$$

Далі, знайшовши $T_{1,l}^{(rj)}(k)$ для кожного $l, k+2 \leq l \leq n$, покладемо

$$T_1^{(rj)}(k) = \min\{T_{1,k+1}^{(rj)}(k), T_{1,k+2}^{(rj)}(k), \dots, T_{1,n}^{(rj)}(k)\}.$$

Позначимо через $x_1^{(rj)}$ ту точку з $x_{1,k+1}^{(rj)}, x_{1,k+2}^{(rj)}, \dots, x_{1,n}^{(rj)}$, яка відповідає мінімальному з $T_{1,k+1}^{(rj)}(k), T_{1,k+2}^{(rj)}(k), \dots, T_{1,n}^{(rj)}(k)$, через $a_{rj}^{(11)}$ та $b_{rj}^{(11)}$ – коефіцієнти тієї прямої, яка перетинається в точці $x_1^{(rj)}$ з прямою $a_{rj}^{(1)}x + b_{rj}^{(1)}$.

Таким чином, парі точок (x_r, y_r) та (x_j, y_j) , $0 \leq r \leq k, 0 \leq j \leq k, r \neq j$, співставляємо точку $x_1^{(rj)}$ та число $T_1^{(rj)}(k)$.

Далі, з точок множини $D_k^{(1)}$ будуюмо C_{k+1}^2 прямих, які проходять через дві з них (можливо, деякі з них співпадатимуть), та для кожної такої прямої (яка визначається точками (x_r, y_r) та (x_j, y_j)) знаходимо точку $x_1^{(rj)}$ та число $T_1^{(rj)}(k)$.

Покладемо

$$T_1(k) = \min_{rj} \{T_1^{(rj)}(k)\} = T_1^{(r'j')}(k);$$

$$x^{(1)} = x_1^{(r'j')}(k);$$

$$\bar{a}_1^{(1)} = a_{r',j'}^{(1)}; \quad \bar{a}_2^{(1)} = a_{r',j'}^{(11)};$$

$$\bar{b}_1^{(1)} = b_{r',j'}^{(1)}; \quad \bar{b}_2^{(1)} = b_{r',j'}^{(11)}.$$

Крок 3. Візьмемо дві точки з множини $D_k^{(2)}$ та проведемо через них пряму. Нехай така пряма проходить через точки (x_r, y_r) та (x_j, y_j) , $k+1 \leq r \leq n, k+1 \leq j \leq n, r \neq j$, (позначимо її $a_{rj}^{(2)}x + b_{rj}^{(2)}$).

З множини $D_k^{(1)}$ візьмемо точку (x_l, y_l) , $0 \leq l \leq k-1$. Будуюмо пряму, яка проходить через точки $(x_k, a_{rj}^{(2)}x_k + b_{rj}^{(2)})$ та (x_l, y_l) (позначимо її $a_{kl}^{(2)}x + b_{kl}^{(2)}$); покладемо

$$x_{kl}^{(2)} = x_k;$$

$$T^{(2)}(kl) = \rho_{kl}^{(2)}(k) + \rho_{rj}^{(2)}(k),$$

де

$$\rho_{kl}^{(2)}(k) = \sum_{i=0}^k |y_i - a_{kl}^{(2)} x_i - b_{kl}^{(2)}|,$$

$$\rho_{rj}^{(2)}(k) = \sum_{i=k+1}^n |y_i - a_{rj}^{(2)} x_i - b_{rj}^{(2)}|.$$

Далі, будемо пряму, яка проходить через точки $(x_{k+1}, a_{rj}^{(2)} x_{k+1} + b_{rj}^{(2)})$ та (x_l, y_l) (позначимо її $a_{k+1,l}^{(2)} x + b_{k+1,l}^{(2)}$); покладемо

$$x_{k+1,l}^{(2)} = x_{k+1};$$

$$T^{(2)}(k+1, l) = \rho_{rj}^{(2)}(k) + \rho_{k+1,l}^{(2)}(k),$$

де

$$\rho_{k+1,l}^{(2)}(k) = \sum_{i=0}^k |y_i - a_{k+1,l}^{(2)} x_i - b_{k+1,l}^{(2)}|.$$

Покладемо

$$T_{2,l}^{(rj)}(k) = \min\{T^{(2)}(kl), T^{(2)}(k+1, l)\}.$$

Позначимо через $x_{2,l}^{(rj)}$ ту точку з множини

$$X_{2,l}^{(rj)} = \{x_{k,l}^{(2)}, x_{k+1,l}^{(2)}\},$$

яка відповідає мінімальному з $T^{(2)}(kl)$, $T^{(2)}(k+1, l)$.

Нарешті, будемо пряму, яка проходить через точки $(x_{k+1}, a_{rj}^{(2)} x_{k+1} + b_{rj}^{(2)})$ та (x_k, y_k) (позначимо її $a_{k,k+1}^{(2)} x + b_{k,k+1}^{(2)}$); покладемо

$$x_{2,k}^{(rj)} = x_{k+1};$$

$$T_{2,k+1}^{(rj)}(k) = \rho_{k,k+1}^{(2)}(k) + \rho_{rj}^{(2)}(k),$$

де

$$\rho_{k,k+1}^{(2)}(k) = \sum_{i=0}^k |y_i - a_{k,k+1}^{(2)} x_i - b_{k,k+1}^{(2)}|.$$

Далі, знайшовши $T_{2,l}^{(rj)}(k)$ для кожного l , $0 \leq l \leq k-1$, покладемо

$$T_2^{(rj)}(k) = \min\{T_{2,0}^{(rj)}(k), \dots, T_{2,k-1}^{(rj)}(k), T_{2,k}^{(rj)}(k)\},$$

Позначимо через $x_2^{(rj)}$ ту точку з $x_{2,0}^{(rj)}, \dots, x_{2,k-1}^{(rj)}, x_{2,k}^{(rj)}$, яка відповідає мінімальному з $T_{2,0}^{(rj)}(k), \dots, T_{2,k-1}^{(rj)}(k), T_{2,k}^{(rj)}(k)$, через $a_{rj}^{(22)}$ та $b_{rj}^{(22)}$ — коефіцієнти тієї прямої, яка перетинається в точці $x_2^{(rj)}$ з прямою $a_{rj}^{(2)} x + b_{rj}^{(2)}$.

Таким чином, парі точок (x_r, y_r) та (x_j, y_j) , $k+1 \leq r \leq n$, $k+1 \leq j \leq n$, $r \neq j$, співставляємо точку $x_2^{(rj)}$ та число $T_2^{(rj)}(k)$.

Далі, з точок множини $D_k^{(2)}$ будемо C_{n-k}^2 прямих, які проходять через дві з них (можливо, деякі з них співнададуть), та для кожної такої прямої (яка визначається точками (x_r, y_r) та (x_j, y_j)) знаходимо точку $x_2^{(rj)}$ та число $T_2^{(rj)}(k)$.

Покладемо

$$T_2(k) = \min_{r,j} \{T_2^{(rj)}(k)\} = T_2^{(r'j')}(k);$$

$$x^{(2)} = x_2^{(r'j')}(k);$$

$$\hat{a}_2^{(2)} = a_{r'j'}^{(2)}; \quad \hat{a}_1^{(2)} = a_{r'j'}^{(22)};$$

$$\hat{b}_2^{(2)} = b_{r'j'}^{(2)}; \quad \hat{b}_1^{(2)} = b_{r'j'}^{(22)}.$$

Насамкінець покладемо

$$T(k) = \min\{T_1(k), T_2(k)\}.$$

Позначимо через $\hat{x}_k^*$ позначимо ту з точок $x^{(1)}, x^{(2)}$, яка відповідає мінімальному $T_1(k), T_2(k)$.

Якщо $\hat{x}_k^* = x^{(1)}$, то

$$\hat{a}_1^{(k)} = \hat{a}_1^{(1)}; \quad \hat{a}_2^{(k)} = \hat{a}_2^{(1)};$$

$$\hat{b}_1^{(k)} = \hat{b}_1^{(1)}; \quad \hat{b}_2^{(k)} = \hat{b}_2^{(1)}.$$

Якщо $\hat{x}_k^* = x^{(2)}$, то

$$\hat{a}_1^{(k)} = \hat{a}_1^{(2)}; \quad \hat{a}_2^{(k)} = \hat{a}_2^{(2)};$$

$$\hat{b}_1^{(k)} = \hat{b}_1^{(2)}; \quad \hat{b}_2^{(k)} = \hat{b}_2^{(2)}.$$

Таким чином, для кожного відрізка $[x_k, x_{k+1}]$, $k = 0, 1, \dots, n-1$, маємо значення $T(k), \hat{x}_k^*, \hat{a}_1^{(k)}, \hat{b}_1^{(k)}, \hat{a}_2^{(k)}, \hat{b}_2^{(k)}$.

Знаходимо

$$T = \min_k \{T(k)\} = T(k');$$

покладемо

$$\hat{x}^* = \hat{x}_{k'}^*.$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_1 &= \hat{a}_1^{(k')}; & \bar{a}_2 &= \bar{a}_2^{(k')}; \\ \hat{b}_1 &= \hat{b}_1^{(k')}; & \bar{b}_2 &= \bar{b}_2^{(k')}.\end{aligned}$$

Далі,

$$\hat{a} = \hat{a}_1; \quad \hat{b} = \bar{b}_1; \quad \hat{c}_1 = \bar{a}_2 - \bar{a}_1.$$

Теорема. Точка $\hat{x}^*$ буде L_1 -оцінкою параметра x^* .

Доведення. Припустимо, L_1 -оцінкою регресії (1) буде функція

$$\begin{aligned}f(x, \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}_1, \bar{x}^*) &= (\bar{a} * x + \bar{b}) + \bar{c}_1(x - \bar{x}^*)_+, \\ &(\bar{x}^* \neq \hat{x}^*).\end{aligned}$$

Точка $\bar{x}^*$ належить якомусь $[x_k, x_{k+1}]$, $k = 1, \dots, n-1$. В цьому відрізку ми визначили $T(k)$ та $\bar{x}_k^*$. Позначимо

$$\bar{T} = \sum_{i=0}^n |y_i - f(x_i, \bar{a}, \bar{b}, \bar{c}_1, \bar{x}^*)|.$$

Якщо $T(k)$ отримано на кроці 1, то $T(k) \leq \bar{T}$, оскільки прямі $a_1x + b_1$ та $a_2x + b_2$ побудовані за методом найменших абсолютних відхилень.

Припустимо, що $T(k)$ та $\hat{x}_k^*$ отримано на кроці 2 або 3. Відомо, що L_1 -оцінка регресії (1) проходить принаймні через три точки (x_i, y_i) ; дві з цих точок належить одній з множин $D_k^{(1)}$ чи $D_k^{(2)}$, третя - іншій.

Поглянемо на суму квадратів відхилень як на функцію від a_l^*

$$T^{(1)}(a_l^*) = \rho_{rj}^{(1)}(k) + \rho^{(1)}(a_l^*),$$

де

$$\rho^{(1)}(a_l^*) = \sum_{i=k+1}^n |y_i - y_l - a_l^*(x_i - x_l)|.$$

Кусково-лінійна опукла функція $\rho^{(1)}(a_l^*)$ досягає свого найменшого значення на відрізку $[x_k, x_{k+1}]$ або на його кінцях, або в точці зламу (якщо такі точки є на $[x_k, x_{k+1}]$), тобто в точці, яка належить одній з множин $X_{1,l}^{(rj)}$, $l = k+2, \dots, n$. Позначимо її $x_{1,l}^{(r^*j^*)}$.

Таким чином, отримуємо, що $T_{1,l}^{(r^*j^*)}(k) \leq \bar{T}$.

Якщо множині $D_k^{(2)}$ належать дві точки

(x_r, y_r) та (x_j, y_j) , множині $D_k^{(1)}$ - точка (x_l, y_l) , функція $\rho^{(1)}(a_l^*)$ досягає найменшого значення в точці, яка належить одній з множин $X_{1,l}^{(rj)}$, $l = k+2, \dots, n$, чи $X_{2,l}^{(rj)}$, $l = 1, \dots, k-1$, тобто $T_{1,l}^{(r^*j^*)}(k) \leq \bar{T}$ також.

Оскільки $T_{1,l}^{(r^*j^*)}(k) \leq T_{1,l^*}^{(r^*j^*)}(k)$, $T_{2,l}^{(r^*j^*)}(k) \leq T_{2,l^*}^{(r^*j^*)}(k)$ для будь-якого l^* , $T_1(k) \leq T_{1,l^*}^{(r^*j^*)}(k)$, $T_2(k) \leq T_{2,l^*}^{(r^*j^*)}(k)$ для будь-якого r^*, j^* , $T \leq T(k) \leq T_1(k)$, $T \leq T(k) \leq T_2(k)$, для будь-якого k .

Таким чином, отримуємо, що $T \leq \bar{T}$. Протиріччя.

Теорему доведено.

Наслідок. $\hat{a}$, $\hat{b}$, $\hat{c}_1$ будуть L_1 -оцінками параметрів a, b, c_1 .

Список використаних джерел

1. Демиденко Е.З. Линейная и нелинейная регрессии. - Москва: Финансы и статистика, 1981.-304 С.
2. Taylor L.D. Estimation by minimising the sum of absolute errors //In: Frontiers in econometrics, ed. Zarembka, N.Y. - 1974.- P.14-18.
3. Епишин Ю.Г. Об оценках параметров регрессии по методу наименьших абсолютных отклонений. - 1974.-т.10,-вып.5. - С.1023-1028.
4. Fletcher R., Grant J.A., Hebden H.D. The calculation of linear least L_p -approximation. //Computer Journal. - 1971.-v.14. -N.3.- P.64-67.
5. Мудров В.И., Кушко В.Л. Методы обработки измерений. - Москва: Сов.радио, 1976.-352 С.
6. Hogan W.W. Norm minimisation and unbiasedness. //Econometrica. - 1976.-v.44. -N.3.- P.611-614.
7. Hudson Derek J. Fitting Segmented Curves Whose Join Points Have to Be Estimated. //JASA. - 1966.-v.61. -N.316.- P.1097-1129.
8. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошников В.Л. Методы сплайн-функций. - Москва: Наука, 1980.-352 С.

Надійшла до редколегії 25.08.10

УДК 519.21

Чечельницький О.А., к. ф.-м. н., доц.

Спільна дифузійна апроксимація тандему систем обслуговування

В статті досліджено модель тандему систем обслуговування. Отримана теорема про дифузійну апроксимацію процесу обслуговування.

Ключові слова: тандем систем обслуговування, система з повторними вимогами, дифузійна апроксимація.

Статтю представив д.т.н., професор Хусайнов Д.Я.

1. Опис моделі.

Сучасний розвиток теорії масового обслуговування має чітку тенденцію до вивчення спільного функціонування груп систем обслуговування, які утворюють складні топологічні структури. Це пов'язано з необхідністю математичного моделювання складних процесів, які виникають у комунікаційних, комп'ютерних, транспортних та банківських мережах, різні вузли яких працюють як різні системи обслуговування. Одним з найпоширеніших випадків є ситуація, коли вузли реальних мереж працюють у тандемах, тобто вимоги після обслуговування в одному вузлі потрапляють на обслуговування до наступного, який може моделюватися, взагалі кажучи, іншою системою обслуговування.

Ми розглянемо модель тандему систем обслуговування, яка складається з двох вузлів. Перший вузол функціонує як система обслуговування типу $\langle M_Q / M_Q / 1 \rangle$, а другий вузол - як система обслуговування з повторними викликами типу $\langle M_Q / M_Q / 1 / w.r. \rangle$. Системи утворюють тандем $\langle M_Q / M_Q / 1 \rangle \rightarrow \langle M_Q / M_Q / 1 / w.r. \rangle$. Вимоги до нашої моделі на інтервалі $[t, t+h]$ надходять парами з ймовірністю $\lambda(a_1, a_2)h + o(h)$, де змінні a_1 та a_2 описують число вимог у першому та другому вузлі відповідно. Перший вузол складається з одного приладу, який

Chechelnit'sky O.A.

Joint diffusion approximation of the tandem queues.

In this paper a tandem queueing system was investigated. The theorem about diffusion approximation of the service process was obtained.

Key Words: tandem queues, queueing system with retrial calls, diffusion approximation.

обслуговує вимоги з зовнішнього потоку випадковий інтервал часу з показниковим розподілом з параметром $\mu_1(a_1, a_2) > 0$. Після обслуговування в першому вузлі вимога обов'язково надходить на обслуговування до другого вузла. Другий вузол працює як система обслуговування з повторними зверненнями вимог. Це означає, що вимога, яка надійшла до вузла i застала $\langle M_Q / M_Q / 1 / w.r. \rangle$ обслуговуючий прилад зайнятим, стає в чергу та утворює незалежний від інших вимог пуассонівський потік повторних запитів з параметром $\nu(a_2) > 0$. Якщо прилад є вільним, він обслуговує вимогу, незалежно від того звідки вона б не надійшла, інтервал часу, який має показниковий розподіл з параметром $\mu_2 > 0$. Через $X_1(t)$ будемо позначати число вимог у першому вузлі, а через $X_2(t)$ - число вимог у другому вузлі. Припустимо, що параметр повторних звернень $\nu(a_2) > 0$ залежить від n (номеру серій) наступним чином: $\nu^{(n)}(a_2) = n^{-1}\nu(a_2)$, а характеристики $X_1(t)$ та $X_2(t)$ розглянемо у зміненому масштабі часу nt : $X_1^{(n)}(t) = X_1(nt)$, $X_2^{(n)}(t) = X_2(nt)$, $X^{(n)}(t) = (X_1^{(n)}(t), X_2^{(n)}(t))$. Справедлива теорема.
Теорема 1. (Закон великих чисел для змішаної моделі тандему систем обслуговування).
Нехай наша модель задовольняє наступним

умовам :

1) функції $\lambda(a_1, a_2)$, $\mu_1(a_1, a_2)$ та $\nu(a_2)$ є локально ліпшецеві по змінним a_1 та a_2 ; крім того $\lambda(a_1, a_2) - \mu_1(a_1, a_2) > 0$, $a_1 > 0$, $a_2 > 0$;

2) $n^{-1}X^{(n)}(0) \xrightarrow{P} S_0$, де $X^{(n)}(0) = (X_1^{(n)}(0), X_2^{(n)}(0))$, $S_0 = (s_0^1, s_0^2)$.

Тоді $\sup_{n \rightarrow \infty} |n^{-1}X^{(n)}(t) - S(t)| \xrightarrow{P} 0$, $n \rightarrow \infty$,

де вектор-функція $s(t) = (s_1(t), s_2(t))$ задовольняє системі диференціальних рівнянь наступного вигляду:

$$\begin{cases} ds_1(t) = (\lambda(s_1(t), s_2(t)) - \mu_1(s_1(t), s_2(t)))dt \\ ds_2(t) = \lambda(s_1(t), s_2(t))dt - m(s_1(t), s_2(t))^{-1}dt \end{cases}$$

де $m(a_1, a_2) =$

$$= \frac{1}{\mu_2} + \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_1\nu(a_1)}$$

Доведення.

Для доведення зазначеного в наведеній теоремі результату використаємо підхід запропонований В.В. Анісімовим, основи якого можна знайти в [1]. Суть цього методу полягає в побудові рекурентного напівмарківського процесу, який моделює процес обслуговування, та доведення його збіжності в рівномірній топології до детермінованого процесу (функції), яка визначається як розв'язок відповідного диференціального рівняння, або системи рівнянь.

З цією метою розглянемо двовимірний процес обслуговування $X_n(t) = (X_n^1(t), X_n^2(t))$ в моменти часу $t_{n1} < t_{n2} < \dots$, що є моментами завершення обслуговування вимоги, яка знаходиться у другому вузлі, $t_{n0} = 0$. Таким чином, $t_{n1} < t_{n2} < \dots$ це послідовні моменти завершення обслуговування у системі з повторними зверненнями $M_X / M_Y / M / 1(w.r.)$, а

$$X_n(t_{nk} + 0) = (X_{nk}^1(t_{nk} + 0), X_{nk}^2(t_{nk} + 0))$$

значення черги в момент завершення обслуговування у вузлі з повторними зверненнями.

Для того, щоб описати функціонування другого вузла марковським процесом, потрібно розглянути двокомпонентний процес

$\pi_n(t) = (X_n^2(t), I_n(t))$, де $I_n(t)$ - число вимог, які знаходяться на обслуговуванні в системі обслуговування $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$.

Вочевидь, що фазовим простором процесу $\pi_n(t)$ є множина пар $\{(i, j) : i = 0, \infty, j = 0, 1\}$. В

той же час наш двоконпонентний марковський процес в моменти завершення обслуговування $\pi_n(t_{nk} + 0)$ повністю визначається значенням першої компоненти $X_{nk}^2 = X_{nk}^2(t_{nk} + 0)$, а друга компонента в цей момент дорівнює нулеві.

Вивчимо розподіл випадкового інтервалу між послідовними закінченнями обслуговування вимог у другому вузлі нашої моделі, який стане базовим для побудови відповідного рекурентного напівмарковського процесу. Для цього позначимо через $\tau_{nk}(na_1, na_2) = t_{nk+1} - t_{nk}$ - інтервал між завершеннями послідовних обслуговувань у системі $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$. Розподіл величини $\tau_{nk}(na_1, na_2)$ вочевидь буде залежати від числа вимог na_1 та na_2 , які знаходяться на обслуговуванні в момент часу t_{nk} у першому та другому вузлі нашої моделі.

Далі, реалізація величини $\tau_{nk}(na_1, na_2)$ відбувається наступним чином. Наша система $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$ очікує випадковий інтервал часу, який має показниковий розподіл з параметром $\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)$, надходження нової вимоги на обслуговуючий прилад другого вузла. Значення параметру визначається тим, що ця випадкова величина є в свою чергу значенням мінімуму від трьох випадкових величин, а саме інтервалу між надходженнями вимог з зовнішнього пуассонівського потоку, інтервалу між надходженнями вимог з першого вузла та інтервалу між надходженнями вимог з потоку повторних викликів. Потім, як складова величини $\tau_{nk}(na_1, na_2)$, незалежним чином реалізується експоненційна з параметром $\mu_2 > 0$ випадкова величина, яка описує тривалість часу обслуговування вимоги в системі $M_X / M_X / M / 1(w.r.)$.

Таким чином, випадкова величина $\tau_{nk}(na_1, na_2)$ представляється у вигляді суми двох незалежних експоненційно розподілених випадкових величин $\tau_{nk}(na_1, na_2) = \theta(a_1, a_2) + \vartheta$, де величина $\theta(a_1, a_2)$ має показниковий розподіл з параметром $\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)$, а випадкова величина ϑ має показниковий розподіл з параметром $\mu_2 > 0$. Отже, процес $\pi_n(t)$ знаходиться в стані $(na, 0)$ протягом

випадкового інтервалу часу, який має показниковий розподіл з параметром

$\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)$, а потім з

імовірністю $\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)}$

починається обслуговування вимоги з зовнішнього пуассонівського потоку, з

імовірністю $\frac{\mu_1(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)}$

починається обслуговування вимоги, яка надійшла після першої системи, або з

імовірністю $\frac{a_2\nu(a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)}$.

повторної вимоги з буферу повторних вимог.

Для подальшого доведення є важливим знайти представлення приростів нашого двовимірного випадкового процесу обслуговування

$X_n(t) = (X_n^1(t), X_n^2(t))$ на випадковому інтервалі $\tau_{nk}(na_1, na_2)$. Вочевидь, що прирости процесу

$X_n(t) = (X_n^1(t), X_n^2(t))$ на цих інтервалах є однорідними і не залежать від номеру k .

Враховуючи цю обставину, позначимо через ξ_{n1}

двовимірний вектор $\xi_{n1} = \begin{pmatrix} \xi_{n1}^1 \\ \xi_{n1}^2 \end{pmatrix}$, перша

компонента якого описує приріст на інтервалі $\tau_{nk}(na_1, na_2)$ процесу обслуговування на

першому, а друга компонента – приріст відповідно на другому вузлі. Розглянемо представлення кожної з введених величин приростів для першого та другого вузлів нашої моделі.

Вивчимо приріст першої компоненти нашого процесу обслуговування, який описує функціонування вузла з системою типу $\langle M_Q / M_Q / 1 \rangle$. З цією метою через $\prod_+(t)$

будемо позначати потік Пуассона з параметром λ . За умови, що $X_n^1(t_{nk}) = na_1$, а $X_n^2(t_{nk}) = na_2$

приріст першої компоненти може бути описаний випадковою величиною $\xi_{n1}^1(na_1, na_2)$ з

наступним розподілом:

$$P\left\{\xi_{n1}^1(na_1, na_2) = \prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) + 1 - \right.$$

$$\left. - \prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) \right\} =$$

$$= \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)},$$

$$P\left\{\xi_{n1}^1(na_1, na_2) = \prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) - \prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) \right\} =$$

$$= \frac{a_2\nu(a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)},$$

$$P\left\{\xi_{n1}^1(na_1, na_2) = \prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) - \right.$$

$$\left. - \left(\prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) + 1 \right) \right\} =$$

$$= \frac{\mu_1(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)}.$$

З визначення системи масового обслуговування типу $\langle M_Q / M_Q / 1 \rangle$ випливає, що введені

величини параметрів слід визначати лише в області $(a_1, a_2) \in R_+$. Тому процес з такими

приростами на інтервалі $t_{nk+1} - t_{nk}$ співпадає з траєкторією процесу $X_n(t)$ лише на тих

проміжках, на яких траєкторії процесу з приростами ξ_{nk}^2 цілком належать простору R_+ .

Знайдемо математичне сподівання приросту першої компоненти:

$$b_n^1(a_1, a_2) =$$

$$= M\xi_{n1}^1 = \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)} \times$$

$$\times \left(M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) + 1 - \prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) \right) \lambda(a_1, a_2) + \right.$$

$$+ M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) - \prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) \right) a_2\nu(a_2) +$$

$$\left. + M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(\vartheta) - \left(\prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) + 1 \right) \right) \mu_1(a_1, a_2) \right).$$

Використовуючи властивості умовних математичних сподівань, можемо записати:

$$b_n^1(a_1, a_2) = M\xi_{n1}^1 = \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2\nu(a_2)} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left(\int_0^{+\infty} \left\{ \lambda(a_1, a_2) M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(t) + 1 - \prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(t) \right) + \right. \right. \\ & + a_2 v(a_2) M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(t) - \prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(t) \right) + \\ & + \mu_1(a_1, a_2) \times \\ & \left. \times M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2)}(t) - \prod_{\mu_1(a_1, a_2)}(t) - 1 \right) \right\} \mu_2 e^{-\mu_2 t} dt \Bigg) = \\ & = \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)} \times \\ & \times \left(\left(\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_2} + 1 - \frac{\mu_1(a_1, a_2)}{\mu_2} \right) \lambda(a_1, a_2) + \right. \\ & + \left(\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_2} - \frac{\mu_1(a_1, a_2)}{\mu_2} \right) a_2 v(a_2) + \\ & + \left(\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_2} - \frac{\mu_1(a_1, a_2)}{\mu_2} - 1 \right) \mu_1(a_1, a_2) \Bigg) = \\ & = (\lambda(a_1, a_2) - \mu_1(a_1, a_2)) \times \\ & \times \left(\frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)} + \frac{1}{\mu_2} \right). \end{aligned}$$

Розглянемо ситуацію, яка виникає в другому вузлі нашого тандему, тобто системі $M_X / M_Y / M / 1(w.r.)$. Якщо показникові величина ϑ , яка описує тривалість обслуговування, реалізувалася на значенні t , $X_{nk}^1 = na_1$, а $X_{nk}^2 = na_2$, тоді ξ_{n1}^2 має наступний розподіл:

$$\begin{aligned} P \left\{ \xi_{n1}^2(na_1, na_2) = \prod_{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}(t) - 1 \right\} &= \\ &= \frac{a_2 v(a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)}, \\ P \left\{ \xi_{n1}^2(na_1, na_2) = \prod_{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}(t) \right\} &= \\ &= \frac{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)}. \end{aligned}$$

Використовуючи формулу повної ймовірності для умовних математичних сподівань, знайдемо

математичне сподівання приросту другої компоненти процесу обслуговування:

$$\begin{aligned} b_n^2(a_1, a_2) &= \\ &= M \xi_{n1}^2 = \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)} \times \\ & \times \left(M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) - 1 \right) a_2 v(a_2) + \right. \\ & + M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}(\vartheta) \right) \times \\ & \times (\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)) \Bigg) = \\ &= \frac{1}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)} \times \\ & \times \left(a_2 v(a_2) \int_0^{+\infty} M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}(t) - 1 \right) \times \right. \\ & \times \mu_2 e^{-\mu_2 t} dt + (\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)) \times \\ & \times \int_0^{+\infty} M \left(\prod_{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}(t) \right) \mu_2 e^{-\mu_2 t} dt \Bigg) = \\ &= \frac{a_2 v(a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)} \times \\ & \times \left(\frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_2} - 1 \right) + \\ & + \frac{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)} \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_2} = \\ &= \frac{\lambda(a_1, a_2)}{\mu_2} - \frac{a_2 v(a_2)}{\lambda(a_1, a_2) + \mu_1(a_1, a_2) + a_2 v(a_2)}. \end{aligned}$$

Для доведення закону великих чисел для нашого процесу обслуговування скористаємось теоремою 4.1, доведеною В.В. Анісімовим, яка наведена в посібнику [1] на сторінці 99. Користуючись результатами про збіжність в рівномірній топології суперпозиції випадкових процесів, В.В. Анісімовим для напівмарковських процесів спеціального виду був доведений наступний результат.

Нехай при кожному $n \geq 1$ задані незалежні у сукупності сімейства випадкових векторів $\{(\xi_{nk}(a), \tau_{nk}(a)), a \in R^m\}, k \geq 0$ зі значеннями в просторі $R^m \times [0, \infty)$, вимірні по аргументу a стосовно борелівської σ -алгебри в

$R^m \times [0, \infty)$, та незалежна від введеного сімейства випадкова величина S_{n0} , яка описує початкове значення. Розглянемо послідовності випадкових величин, які задаються рекурентним чином:

$$\begin{aligned} t_{n0} &= 0 \\ S_{nk+1} &= S_{nk} + \xi_{nk}(S_{nk}) \\ t_{nk+1} &= t_{nk} + \tau_{nk}(S_{nk}), k \geq 0. \end{aligned}$$

На цих послідовностях побудуємо напівмарковський процес $S_n(t)$:

$$S_n(t) = S_{nk}, \text{ якщо } t_{nk} \leq t < t_{nk+1}, t \geq 0.$$

Як видно з побудови процес $S_n(t)$ є неоднорідним напівмарківським процесом. Для вивчення нашої моделі достатньо розглянути однорідний випадок, коли розподіли випадкових величин $\xi_{nk}(a)$, та $\tau_{nk}(a)$ не залежать від індексу k . Позначимо через $m_n(a) = M\tau_{n1}(na)$, $b_n(a) = M\xi_{n1}(na)$.

Має місце наступна теорема.

Теорема 2.

Нехай для напівмарківського процесу $S_n(t)$ виконані наступні умови:

- 1) $M\tau_{n1}(a)^2 + M|\xi_{n1}(a)|^2 < C$;
- 2) для будь-якої константи $L > 0$, якщо $|a_1| \vee |a_2| < L$: $|m_n(a_1) - m_n(a_2)| + |b_n(a_1) - b_n(a_2)| < C_L |a_1 - a_2| + c_n$, де $c_n \rightarrow 0$ рівномірно по $|a_1| \vee |a_2| < L$;
- 3) існують функції $m(a) > 0, b(a)$ такі, що для будь-якого $a \in R^m$:

$$\begin{aligned} m_n(a) &\rightarrow m(a), & b_n(a) &\rightarrow b(a), & \text{де} \\ |b(a)| &\leq C(1 + |a|) \end{aligned}$$

$$\text{Тоді } \sup_{0 \leq t \leq T} \left| \frac{1}{n} S_n(nt) - s(t) \right| \xrightarrow{p} 0,$$

де функція $s(t)$ задовольняє диференційному рівнянню $ds(t) = b(s(t))m(s(t))^{-1} dt$, $s(0) = s_0$.

Повертаючись до аналізу нашої моделі, можемо зауважити, що процес

$$S_n(t) = (X^1(t_{nk} + 0), X^2(t_{nk} + 0)) \quad \text{для}$$

$t_{nk} \leq t < t_{nk+1}$. де $t_{nk+1} = t_{nk} + \tau_{nk}(na_1, na_2)$ є напівмарковським, для якого можна застосувати

результат вищенаведеної теореми. А саме, умова 1) на другі моменти є вочевидь виконаною, оскільки існують другі моменти у показникового та пуассонівського розподілів, умова 2) буде виконуватись, якщо передбачити, що функції $\lambda(a_1, a_2)$, $\nu(a_1)$ та $\mu_2(a_1, a_2)$ є локально ліцпшнвеші по кожній змінній. Крім того, в наслідок попередніх розрахунків, математичні сподівання часу перебування напівмарковського процесу $S_n(t)$ та його приростів задовольняють умові 3). Умова 4) на початкове значення також є виконаною. Таким чином, для будь-якого $T > 0$ будемо мати

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \left| \frac{1}{n} S_n(nt) - s(t) \right| \xrightarrow{p} 0, \quad \text{де вектор-функція}$$

$s(t) = (s_1(t), s_2(t))$ задовольняє системі диференційних рівнянь наступного вигляду:

$$\begin{cases} ds_1(t) = (\lambda(s_1(t), s_2(t)) - \mu_1(s_1(t), s_2(t)))dt \\ ds_2(t) = \lambda(s_1(t), s_2(t))dt - m(s_1(t), s_2(t))^{-1} dt \end{cases}$$

Дифузійна апроксимація змішаного тандему систем обслуговування.

Для доведення теореми про збіжність у рівномірній топології випадкового процесу $S_n(t)$ використаємо відповідну теорему, доведену В.В. Анісімовим [1].

Нехай $S_n(t)$ є напівмарківським процесом рекурентного типу, який розглядався в теоремі про закон великих чисел (1). Введемо послідовність випадкових процесів

$$\zeta_n(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} (S_n(nt) - ns(t)), t \geq 0, \quad \text{де}$$

$s(t)$ задовольняє диференційному рівнянню з теореми про закон великих чисел. Будемо позначати

$$\rho_{nk}(a) = \xi_{nk}(na) - b_n(a) - \bar{b}(a)(\tau_{nk}(na) - m_n(a)),$$

$$D_n^2(a) = M\rho_{n1}(a)\rho_{n1}(a)^*,$$

$$q_n(a, z) = \sqrt{n} \left(\tilde{b}_n \left(a + \frac{z}{\sqrt{n}} \right) - \tilde{b}(a) \right), \quad a, z \in R^m,$$

$$\text{де } \tilde{b}_n(a) = b_n(a)m_n(a)^{-1}, \quad \tilde{b}(a) = b(a)m(a)^{-1}.$$

Теорема 3. Нехай є виконаними умови теореми 2 (1). величина c_n в умові 2) є такою, що $\sqrt{nc_n} \rightarrow 0$, та для будь-якого $L > 0$ і при $|a_1| \vee |a_2| < L$:

1) $|D_n(a_1) - D_n(a_2)| \leq C_L |a_1 - a_2| + \alpha_n$, де $\alpha_n \rightarrow 0$ рівномірно по $|a_1| \vee |a_2| < L$;

2) для будь-яких $a, z \in R^m$

$q_n(a, z) \rightarrow Q(a)z + g(a)$, $D_n^2(a) \rightarrow D^2(a)$, де функції $Q(a)$ та $g(a)$ неперервні;

3) $\lim_{n \rightarrow +\infty} \sup_{|a| < L} (M \tau_{n1}^2(a) \chi(\tau_{n1}^2(a) > N) + M \xi_{n1}^2(a) \chi(\xi_{n1}^2(a) > N)) \rightarrow 0$

та $\zeta_n(0) \xrightarrow{c} \zeta_0$.

Тоді послідовність випадкових процесів $\zeta_n(t)$ збігається в рівномірній топології на будь-якому інтервалі $[0, T]$ такому, що з ймовірністю 1

$y(+\infty) > T$, де $y(t) = \int_0^t m(\eta(u)) du$, а $\eta(t)$

задовольняє диференційному рівнянню $d\eta(t) = b(\eta(t))dt$, $\eta_0 = s_0$, до дифузійного процесу $\zeta(t)$, який задовольняє стохастичному диференційному рівнянню

$$d\zeta(t) = (Q(s(t))\zeta(t) + g(s(t)))dt + D(s(t))m(s(t))^{-1/2}dw(t)$$

$$\zeta(0) = \zeta_0,$$

де $w(t)$ - стандартний вінерівський процес в просторі R^m .

Використаємо наведену теорему для доведення збіжності до дифузійного процесу напівмаков-ського процесу $X_n(t)$.

Теорема 4. Якщо додатково до умов теореми 1 функції $\lambda(a_1, a_2)$, $\nu(a_2)$ та $\mu_1(a_1, a_2)$ мають неперервні похідні по кожному аргументу, при

$n \rightarrow +\infty$, $\frac{1}{\sqrt{n}}(X_n(0) - ns_0) \xrightarrow{c} \zeta_0$, тоді

послідовність випадкових процесів

$$\zeta_n(t) = \frac{1}{\sqrt{n}}(X_n(nt) - ns(t)), \quad t \geq 0$$

збігається на будь-якому проміжку $[0, T]$ в рівномірній топології до процесу $\zeta(t)$, який задовольняє стохастичному диференційному рівнянню:

$$d\zeta(t) = G(s(t))\xi(t)dt + B(s(t))dw(t),$$

де перша компонента вектору переносу $G(s(t)) = (G_1(s_1(t), s_2(t)), G_2(s_1(t), s_2(t)))$ має

вигляд $G_1(s_1(t), s_2(t)) = g_1(s_1(t), s_2(t))$, де функція $g_1(a_1, a_2) = \frac{\partial}{\partial a_1}(\lambda(a_1, a_2) - \mu_1(a_1, a_2))$,

а друга компонента вектору переносу представляється у вигляді:

$G_2(s_1(t), s_2(t)) = g_2(s_1(t), s_2(t))$, де функція $g_2(a_1, a_2)$ представляється у вигляді $g_2(a_1, a_2) = \frac{\partial}{\partial a_2}(\lambda(a_1, a_2) - m(a_1, a_2)^{-1})$ Матриця

$$B^2(s(t)) = \begin{pmatrix} b_{11}(s(t)) & b_{12}(s(t)) \\ b_{21}(s(t)) & b_{22}(s(t)) \end{pmatrix} \in$$

матрицею з компонентами

$$b_{11}(s_1(t), s_2(t)) = \lambda(s_1(t), s_2(t)) + \mu_1(s_1(t), s_2(t))$$

$$b_{22}(s(t)) = (\lambda(s_1(t), s_2(t)) + \mu_1(s_1(t), s_2(t))) \times$$

$$\times m(s_1(t), s_2(t)) +$$

$$+ \sigma^2(s_1(t), s_2(t)) m(s_1(t), s_2(t))^{-2} -$$

$$- 2(\lambda(s_1(t), s_2(t)) + \mu_1(s_1(t), s_2(t))) \times$$

$$\times m(s_1(t), s_2(t))^{-1} \times$$

$$\times (\lambda(s_1(t), s_2(t)) + \mu_1(s_1(t), s_2(t)) + s_2(t)\nu(s_2(t)))^{-2}$$

$$\sigma^2(s_1(t), s_2(t)) = \frac{1}{\mu_1^2} +$$

$$+ (\lambda(s_1(t), s_2(t)) + \mu_1(s_1(t), s_2(t)) +$$

$$+ s_2(t)\nu(s_2(t)))^{-2}$$

$$b_{12}(s_1(t), s_2(t)) = \lambda(s_1(t), s_2(t)) + \mu_1(s_1(t), s_2(t));$$

$$b_{21}(s_1(t), s_2(t)) = \lambda(s_1(t), s_2(t)).$$

Отже, апроксиматично при $n \rightarrow \infty$ можна вважати, що складний двовимірний процес обслуговування у вузлах нашої мережевої моделі еквівалентним процесу $ns(t) + \sqrt{n}\xi(t)$, тобто

$$\begin{pmatrix} X_n^1(t) \\ X_n^2(t) \end{pmatrix} \approx n \begin{pmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{pmatrix} + \sqrt{n} \begin{pmatrix} \xi_1(t) \\ \xi_2(t) \end{pmatrix}.$$

Список використаних джерел.

1. Анисимов В.В., Лебедев Е.А. Стохастические сети обслуживания. Марковские модели. - Киев: Лыбидь, - 1992. - С. 208.
2. Anisimov V.V. Averaging Methods for Overloading Retrial Queueing Systems // Mathematical and Computer Modelling. - 1999. - № 30. - С. 65-78.

Надійшла до редакції 21.11.2009

УДК 519.962.22

Чухрай Л.В., аспірант.

Мінімаксне оцінювання крайових умов для сингулярного одновимірного параболічного рівняння в умовах невизначеності

У даній роботі знайдено мінімаксні оцінки крайових умов для сингулярного одновимірного параболічного рівняння при спостереженнях за станом системи, які описуються цими параболічними рівняннями.

При цьому вважається, що крайові умови оцінювання точно невідомі, а відомі лише множини, яким вони належать.

Встановлено, що знаходження мінімаксних оцінок зводиться до розв'язку деяких систем інтегро-диференціальних рівнянь, які для регуляризованих оцінок є однозначно розв'язними.

Ключові слова: мінімаксна оцінка, похибка оцінювання.

E-mail: l.chukhray@mail.ru

Стаття представив д.т.н., проф. Гаращенко Ф.Г.

Нехай функція $\varphi(x, t) \in L_2(\Omega_T)$ є розв'язком параболічної крайової задачі

$$\beta(t)\varphi_x = \alpha(t)\varphi_{xx}, (x, t) \in \Omega_T \quad (1)$$

з крайовими умовами

$$\begin{aligned} \varphi(0, t) &= 0, t \in (0, T], \\ \varphi(h, t) &= \mu(t), t \in (0, T] \end{aligned} \quad (2)$$

та початковою умовою

$$\varphi(x, 0) = 0, t \in (0, T], \quad (3)$$

де

$$\Omega_T = \{(x, t) : 0 < x < h, 0 < t \leq T\}, \beta(t) > 0, \alpha(t) > 0,$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\beta(t)}{t^m} = 0, m \geq 1; \mu(t) \in L_2(\Omega_T).$$

Припускається, що на інтервалі $(0, T]$ спостерігається функція

$$r(t) = (y_1(t), \dots, y_N(t)),$$

де

$$y_k(t) = \int_0^h h_k(t, x) \varphi(x, t) dx, \quad k = \overline{1, N}, \quad (4)$$

де $h_k(t, x) \in C(\Omega_T)$.

Будемо вважати, що $\mu(t)$ не визначена точно, а відомо, що вона задовольняє умову

L.V. Chukhray, PhD student

Minimax estimation of bounded value conditions for singular one-dimensional parabolic equation under incomplete data

In this paper the minimax estimates of bounded value conditions for singular one-dimensional parabolic equation are found from observations as the state of system, which are described by these bounded value problems.

Here it is assumed that the bounded value conditions of estimation are unknown exactly. But the sets to which they belong are known.

It is established that the determination of the minimax estimates is reduced to solving some systems of integro-differential equations

Key Words: minimax estimate, error of estimation.

$$\int_0^T (\mu^{(n)}(t))^2 dt \leq q^2, \quad (5)$$

де $\mu^{(n)}(t)$ - похідна n-го порядку.

Позначимо через G_0 множини функцій $\mu(t)$, що задовольняють умову (5). Задача мінімаксного оцінювання полягає в тому, щоб за спостереженнями вигляду (4) за станом системи, що описується крайовою задачею (1)-(3) при умові (5), оцінити лінійний функціонал

$$L(\mu) = \int_0^T l(t) \mu(t) dt \quad (6)$$

в класі лінійних оцінок вигляду

$$\tilde{L}(\mu) = \int_0^T \sum_{k=1}^N u_k(t) y_k(t) dt, \quad (7)$$

де $u_k(t) \in L_2[0, T]$.

Оцінку $\tilde{L}(\mu)$, яка визначається як розв'язок екстремальної задачі

$$\inf_{\mu \in G_0} \sup_{\mu \in G_0} |L(\mu) - \tilde{L}(\mu)|^2 = \sup_{\mu \in G_0} |L(\mu) - \tilde{L}(\mu)|^2 =$$

називають мінімаксною оцінкою функціоналу (6), а величину

$$\sigma^2 = \sup_{\mu(t)} |L(\mu) - \hat{L}(\mu)|^2$$

мінімаксною похибкою оцінювання.

Введемо $z_n(t)$ як розв'язок системи диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \frac{dz_1(t)}{dt} = l(t) + \frac{\alpha(t)}{\beta(t)} z_1(h, t), z_1(0) = 0, \\ \frac{dz_2(t)}{dt} = z_1(t), z_2(0) = 0, \\ \dots \\ \frac{dz_n(t)}{dt} = z_{n-1}(t), z_n(0) = 0. \end{cases}$$

Введемо множину

$$U = \{u_k(t) : z_1(T) = z_2(T) = \dots = z_n(T) = 0\}.$$

Теорема 1. Мінімаксна оцінка $L(\mu)$ має вигляд

$$\hat{L}(\mu) = \int_0^T \sum_{k=1}^N \hat{u}_k(t) y_k(t) dt$$

і похибка оцінювання дорівнює

$$\sigma^2 = \sup_{\mu(t)} |L(\mu) - \hat{L}(\mu)|^2,$$

де $\hat{u}_k(t)$ визначається з рівності

$$\int_0^T \int_0^h \sum_{k=1}^N h_k(x, t) p(x, t) dx dt \equiv 0,$$

а функція $p(x, t)$ визначається з системи рівнянь

$$\begin{cases} \beta(t) \frac{\partial^2 \bar{z}(x, t)}{\partial t^2} - \alpha(t) \frac{\partial^2 \bar{z}(x, t)}{\partial x^2} + \sum_{k=1}^N v_k(t) h_k(x, t), \\ \bar{z}(t, 0) = \bar{z}(t, h) = 0, \bar{z}(T, x) = 0, \\ \beta(t) \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \alpha(t) \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}, \\ p(0, x) = 0, \\ p(t, 0) = 0, p(t, h) = q_1^2 z_n^2(t). \end{cases}$$

Доведення. Покажемо що мають місце наступні леми.

Лема 1. Задача мінімаксного оцінювання еквівалентна задачі оптимального керування параболічним рівнянням

$$\beta(t) \frac{\partial^2 z(x, t)}{\partial t^2} - \alpha(t) \frac{\partial^2 z(x, t)}{\partial x^2} + \sum_{k=1}^N u_k(t) h_k(x, t), \quad (8)$$

$$z(t, 0) = z(t, h) = 0, z(T, x) = 0, \quad (9)$$

$$z(x, t) = z(x, t, u_1, \dots, u_N) \in \Omega_T,$$

з критерієм якості

$$I(u) = \int_0^T z_n^2(t) q_1^2 dt \rightarrow \min_{u_1, \dots, u_N},$$

де $U = \{u_k(t) : z_1(T) = z_2(T) = \dots = z_n(T) = 0\}$, при умові, що ця множина не порожня.

Доведення. Враховуючи (1)-(4), (6)-(9) і застосовуючи інтегрування частинами, знаходимо

$$\begin{aligned} L(\mu) - \hat{L}(\mu) &= \int_0^T l(t) \mu(t) dt - \int_0^T \sum_{k=1}^N u_k(t) y_k(t) dt = \\ &= \int_0^T l(t) \mu(t) dt - \int_0^T \sum_{k=1}^N u_k(t) \int_0^h h_k(t, x) \phi(x, t) dx dt. \end{aligned}$$

Використовуючи (8), зробимо заміну

$$\int_0^T l(t) \mu(t) dt - \int_0^T \int_0^h (-\beta(t) \frac{\partial z(x, t)}{\partial t} - \alpha(t) \frac{\partial^2 z(x, t)}{\partial x^2}) \phi(x, t) dx dt.$$

Проінтегрувавши цей вираз частинами, отримаємо

$$L(\mu) - \hat{L}(\mu) = \int_0^T (l(t) + \frac{\alpha(t)}{\beta(t)} z_1(h, t)) \mu(t) dt.$$

В силу рівності Коші-Буняковського та (5) отримаємо

$$\sup_{\mu(t)} |L(\mu) - \hat{L}(\mu)|^2 = \begin{cases} \int_0^T z_n^2(t) q_1^2 dt \equiv I(u_1, \dots, u_N), \forall u_k(t) \neq 0, u_k(t) \in U \\ \infty, \forall u_k(t) \notin U. \end{cases}$$

Нехай $\hat{u}$ - такий вектор, при якому $I(\hat{u}) = \inf_u I(u)$, $\bar{z}(x, t) = \bar{z}(x, t, \hat{u}_1, \dots, \hat{u}_N)$.

Тоді повинно виконуватись наступне

$$\frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} I(\hat{u} + \tau v_1, \dots, \hat{u}_N + \tau v_N) \Big|_{\tau=0} = 0, \forall v_1, \dots, v_N,$$

$$\frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} I(\hat{u} + \tau v) \Big|_{\tau=0} = \int_0^T q_1^2 z_n(t) \bar{z}_1(x, t) dt \equiv 0, \forall v_1, \dots, v_N. \quad (10)$$

Лемі 1 доведено.

Лема 2. Мінімаксна оцінка функціоналу $L(\mu)$ має вигляд

$$\hat{L}(\mu) = \int_0^T \sum_{k=1}^N \hat{u}_k(t) y_k(t) dt,$$

де $\hat{u}_k(t)$ визначається з інтегрального рівняння (10), а функція $p(x, t)$ визначається з розв'язку системи рівнянь

$$\begin{cases} \beta(t) \frac{\partial \tilde{z}(x,t)}{\partial t} - \alpha(t) \frac{\partial^2 \tilde{z}(x,t)}{\partial x^2} + \sum_{k=1}^N v_k(t) h_k(x,t), \\ \tilde{z}(t,0) = \tilde{z}(t,h) = 0, \tilde{z}(T,x) = 0, \\ \beta(t) \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} - \alpha(t) \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}, \\ p(0,x) = 0, \\ p(t,0) = 0, p(t,h) = q_1^2 z_n^2(t), \end{cases} \quad (11)$$

яка є однозначно розв'язною, а мінімаксна похибка оцінювання функціоналу $L(\mu)$ визначається рівністю

$$\sigma^2 = \int_0^T z_n^2(t) q_1^2 dt.$$

Доведення. Відомо, що $I(\tilde{u}) = \int_0^T z_n^2(t) q_1^2 dt$.

$$\frac{1}{2} \frac{d}{d\tau} I(\tilde{u} + \tau v) \Big|_{\tau=0} = \int_0^T q_1^2 z_n(t) \tilde{z}_v(x,t) dt = 0.$$

Використавши (11) запишемо наступне

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_0^h (\beta(t) \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} - \alpha(t) \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}) \tilde{z}(x,t) dx dt + \\ + \int_0^T q_1^2 z_n(t) \tilde{z}_v(x,t) dt = 0. \end{aligned}$$

Проінтегрувавши частинами та врахувавши початкові і крайові умови системи (11) та систему рекурентних диференціальних рівнянь для визначення $z_n(t)$, отримаємо

$$\int_0^T \int_0^h \sum_{k=1}^N h_k(x,t) p(x,t) v_k(t) dx dt = 0, \forall v_1(t), \dots, v_N(t).$$

Цяну тотожність можна подати в наступному вигляді

$$\int_0^T \int_0^h \sum_{k=1}^N h_k(x,t) p(x,t) dx dt = 0, \forall v_1(t), \dots, v_N(t).$$

Лему 2 доведено. Теорему 1 доведено.

Зауваження 1. Якщо записати критерій якості в наступному вигляді

$$I(u_1, \dots, u_N) + \gamma^2 \int_0^T \sum_{k=1}^N u_k^2(t) dt \equiv I_\gamma(u_1, \dots, u_N), \gamma \rightarrow 0,$$

то в умовах теореми 1 можна отримати регуляризовану мінімаксну оцінку функціоналу $L(\mu)$ у вигляді

$$\tilde{L}_\gamma(\mu) = \int_0^T \sum_{k=1}^N \tilde{u}_k(t) v_k(t) dt,$$

$$\text{де } \tilde{u}_k(t) = \gamma^{-2} \int_0^h \sum_{k=1}^N h_k(x,t) p(x,t) dx, \gamma \rightarrow 0.$$

Доведення. Нехай $\tilde{u}$ – такий вектор при якому $I_1(\tilde{u}) = \inf_u I_1(u)$, $\tilde{z}(x,t) = \tilde{z}(x,t, \tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N)$.

Провівши аналогічні перетворення, як і в теоремі 1 отримаємо потрібну рівність

$$\tilde{u}_k(t) = -\gamma^{-2} \int_0^h \sum_{k=1}^N h_k(x,t) p(x,t) dx, \gamma \rightarrow 0.$$

Функція $p(x,t)$ визначається аналогічно, як у теоремі 1.

Також можна записати явне представлення розв'язку $\varphi(x,t)$ параболічної крайової задачі (1)-(3)

$$\varphi(x,t) = \int_0^T G_1(x,t,\xi,\tau) \frac{\alpha(\tau)}{\beta(\tau)} \mu(\tau) d\tau,$$

де $G_1(x,t,\xi,\tau)$ – функція Гріна першого роду,

$$G_1(x,t,\xi,\tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi(\theta(t) - \theta(\tau))}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[\exp\left(-\frac{(x - \xi + 2nh)^2}{4(\theta(t) - \theta(\tau))}\right) + \exp\left(-\frac{(x + \xi + 2nh)^2}{4(\theta(t) - \theta(\tau))}\right) \right],$$

$$\text{де } \theta(t) = \int_0^t \frac{\alpha(\tau)}{\beta(\tau)} d\tau.$$

Будемо шукати мінімаксну оцінку $\tilde{L}(\mu)$, яка визначається як розв'язок екстремальної задачі:

$$\inf_{u_k(t) \in L_2(\Omega_T)} \sup_{\mu(t)} |L(\mu) - \tilde{L}(\mu)|^2 = \sup_{\mu(t)} |L(\mu) - \tilde{L}(\mu)|^2,$$

при умовах (4), (5'), (6')

$$\int_0^T (\mu^{(n)}(\tau))^2 d\tau \leq q^2, \quad (5')$$

$$L(\mu) = \int_0^T l(\tau) \mu(\tau) d\tau, \quad (6')$$

де $\sigma^2 = \sup_{\mu(t)} |L(\mu) - \tilde{L}(\mu)|^2$ – мінімаксна похибка оцінювання в класі лінійних оцінок вигляду

$$\tilde{L}(\mu) = \int_0^T \sum_{k=1}^N u_k(t) y_k(t) dt, \quad (7')$$

Введемо $z_n(\tau)$ як розв'язок системи рекурентних диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \frac{dz_1(\tau)}{d\tau} = l(\tau) - \sum_{k=1}^N \int_0^T h_k(t,\tau) u_k(t) dt, z_1(0) = 0, \\ \frac{dz_2(\tau)}{d\tau} = z_1(\tau), z_2(0) = 0, \\ \dots \\ \frac{dz_n(\tau)}{d\tau} = z_{n-1}(\tau), z_n(0) = 0. \end{cases}$$

Вислємо множину

$$U = \{u_k(t) : z_1(T) = z_2(T) = \dots = z_n(T) = 0\}.$$

Використовуючи рівність Коші-Буняковського запишемо

$$\sup_{\mu(t) \in Q_0} |L(\mu) - \tilde{L}(\mu)|^2 = \sup_{\mu(t) \in Q_0} \left| \int_0^T l(\tau) \mu(\tau) d\tau - \right.$$

$$\left. \sum_{k=1}^N \int_0^T u_k(t) \int_0^T \tilde{h}_k(t, \tau) \mu(\tau) d\tau dt \right|^2 =$$

$$\sup_{\mu(t) \in Q_0} \left| l(\tau) - \sum_{k=1}^N \int_0^T u_k(t) \tilde{h}_k(t, \tau) dt \right|^2 q_1^2 =$$

$$\begin{cases} \int_0^T z_n^2(\tau) q_1^2 d\tau \equiv I(u_1, \dots, u_N), \forall u_k(t) \neq 0, u_k(t) \in U, \\ \infty, \forall u_k(t) \notin U, \end{cases}$$

$$\text{де } \tilde{h}_k(t, \tau) = \int_0^h h_k(x, t) \frac{a(t)}{\beta(t)} G_{1\tau}(x, t, h, \tau) dx.$$

Повинно виконуватись наступне

$$\frac{1}{2} \frac{d}{d\omega} I(\hat{u}_1 + \omega v_1, \dots, \hat{u}_N + \omega v_N) \big|_{\omega=0} \equiv 0, \forall v_1, \dots, v_N,$$

тобто

$$q_1^2 \int_0^T \sum_{k=1}^N z_k(\tau) v_k(\tau) d\tau = 0, \forall v_1, \dots, v_N.$$

Отримавши систему N інтегральних рівнянь для визначення $z_n(\tau)$ та систему n диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \frac{dz_1(\tau)}{d\tau} = l(\tau) - \sum_{k=1}^N \int_0^T \tilde{h}_k(t, \tau) \tilde{u}_k(t) dt, z_1(0) = 0, \\ \frac{dz_2(\tau)}{d\tau} = z_1(\tau), z_2(0) = 0, \\ \dots \\ \frac{dz_n(\tau)}{d\tau} = z_{n-1}(\tau), z_n(0) = 0. \end{cases}$$

для визначення $\tilde{u}_k(t)$.

Висновки

У даній роботі знайдено мінімаксімі оцінки лінійних функціоналів від крайових умов для сингулярного одновимірного параболічного рівняння.

Дослідження мінімаксімі оцінок проводиться за допомогою побудови спряженої системи та явного представлення розв'язку сингулярного одновимірного параболічного рівняння.

Знаходження мінімаксімі оцінок зводиться до розв'язку систем інтегро-диференціальних рівнянь, які при певних умовах є однозначно розв'язними. Для регуляризованих мінімаксімі

оцінок системи інтегро-диференціальних рівнянь є однозначно розв'язними.

Список використаних джерел

1. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1989. — 459 с.
2. Алексеев В.М., Тихомиров В.М., Фомин С.В. Оптимальное управление. — М.: Наука, 1979. — 430 с.
3. Наконечный О.Г. Оптимальное керування та оцінювання в рівняннях із частинними похідними. Навчальний посібник — ВПЦ «Київський університет», 2004. — 103 с.
4. Наконечный О.Г. Оцінювання параметрів в умовах невизначеності // Наукові записки КНУ ім.Т.Г.Шевченка. — 2004. — Том 7:факультет кібернетики. — С.102-112.
5. Демиденко С., Жук С., Наконечный О. До проблеми мінімаксімі оцінювання розв'язків одновимірних крайових задач //Тавр.вісн.інформ. і мат. — 2007. — №1, С. 7-24.
6. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.:Наука, 1967. — 736 с.
7. Наконечный А.Г. Минимаксное оценивание функционалов от решений вариационных уравнений в гильбертовых пространствах. — Киев:КГУ, 1985. — 82 с.
8. Лионс Ж.-Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. — М.: Мир, 1972. — 407 с.
9. Куржанский А.Б. Управление и наблюдение в условиях неопределенности. — М.: «Наука», 1977. — 393 с.
10. Михайлов В.П. Дифференциальные уравнения в частных производных — М.: «Наука», 1983. — 424 с.

Надійшла до редакції 09.09.2010.

РАДІОФІЗИКА

УДК 621.039.6

Бех* І.І. к.ф.-м.н., доц., Вербицька О.В., студ.,
Ільченко В.В., д.ф.-м.н., проф., Лушкін О. Є.,
к.ф.-м.н., доц., Нагула П.О., інж.

Особливості механізму впливу електричного поля на властивості металевопористих емітерів

Робота присвячена теоретичному вивченню впливу електричного поля на фізико-хімічні та емісійні властивості металевопористих емітерів.

Результати проведених числових оцінок демонструють різний ступінь якісного та кількісного узгодження із експериментальними даними для емітерів із різним матеріалом матриці та різним складом емісійно-активної речовини, що є доказом на користь висновків про те, що процеси формування робочої поверхні емітерів з різним матеріалом матриці та механізм впливу електричного поля на їхні параметри істотно різні.

Ключові слова: електричне поле, термоemisія, автоemisія, металевопористий, скандій.

*E-mail: sun@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Левитський С.М.

Вступ

Введення у металевопористі емітери (МПЕ) скандію у вигляді окису є одним з шляхів покращення їхніх експлуатаційних параметрів. Вивчення властивостей емітерів такого типу не втрачає актуальності, оскільки на сьогодні вони мають кращі характеристики у порівнянні зі звичайними металевопористими емітерами та оксидними емітерами [1, 2].

Результати робіт, виконаних у Київському університеті [3 - 5] показують, що вольт-амперні характеристики (ВАХ) металевопористих емітерів мають принаймні дві особливості, які переконливо свідчать на користь термоавтоелектронного механізму їхньої емісії.

Як було показано нами раніше [5], роль температури з позиції термоавтоелектронного характеру емісії досліджуваних зразків може полягати у зміщенні максимуму концентрації вільних електронів в бік рівня вакууму, що призводить до зростання густини автоemisійного струму, адже більша кількість електронів здатна

I. I. Bekh*, PhD, O. V. Verbytska, student, V. V. Il'chenko, Doct. Sci., Prof., O. E. Lushkin, PhD, Nagula P. O., engineer.

The influence features of the electric field on the properties of the dispensed emitters

The influence features of the electric field on the properties of the dispensed emitters are studied theoretically.

It is shown that the results of the numerical calculations demonstrate the different degree of qualitative and quantitative concordance with experimental data for different types of the dispensed emitters. It is actual proof in behalf of conclusions that the forming processes of the surface of emitters with different matrix material and mechanisms of influencing of the electric field on their properties substantially different.

Key Words: electrical field, thermo emission, field emission, dispenser, scandium.

протунелювати крізь потенціальний бар'єр на межі тверде тіло – вакуум. Залежність прозорості потенціального бар'єру від енергії електронів у [5] розраховувалася в квазікласичному наближенні методом Вентцеля-Крамерса-Брілюєна з використанням "універсального" аналітичного виразу, де лише межі інтегрування (точки повороту) характеризують форму бар'єру. Проте з квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр [6] випливає, що навіть у випадку, коли енергія падаючої на потенціальний бар'єр частинки більша за висоту цього бар'єру, коефіцієнт її відбиття може відрізнятися від нуля.

Метою даної роботи є побудова фізичної моделі емісії з МПЕ з використанням квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр і проведення числової оцінки залежності зміщення енергетичного положення максимуму концентрації електронів в емітері від температури та напруженості електричного поля для випадку трикутного потенціального бар'єру з врахуванням ефекту Шоттки.

Інструменти аналізу та фізична модель

Для розв'язання поставленої задачі була обрана система комп'ютерної алгебри "Mathematica 7.0".

Для всіх числових оцінок, що проводилися в роботі було обрано точність розрахунків до дванадцятого значущого знаку.

В обчисленнях використовувалась система СІ. Фізичні сталі були взяті такими:

- маса електрона, $m = 9.109 \cdot 10^{-31}$ кг;
- заряд електрона, $q = -1.602 \cdot 10^{-19}$ Кл;
- стала Планка, $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с;
- стала Больцмана, $k_B = 1.381 \cdot 10^{-23}$ Дж/К.

Для оцінки вірогідності розрахунків системою комп'ютерної алгебри "Mathematica 7.0" було обчислено залежність прозорості потенціального бар'єру прямокутної форми висотою $U_0 = 0,3$ еВ та товщиною $a = 10$ нм від кінетичної енергії електронів матричним методом з використанням положень квантової теорії тунелювання частинки крізь бар'єр. Графік отриманої залежності наведено на рис. 1. Результати обчислень повністю співпадають з наведеними в [6] Вони наочно демонструють той факт, що при використанні квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр прозорість бар'єру досягає одиниці при енергії електронів, яка перевищує значення висоти потенціального бар'єру і надалі, в

обмеженому діапазоні енергій, є одиницею лише для електронів із певними значеннями кінетичної енергії. В цьому і полягає основна відмінність у ході залежності прозорості потенціального бар'єру від кінетичної енергії електронів при переході від розрахунку в квазікласичному наближенні методом Вентцеля-Крамерса-Брілюена до розрахунку згідно квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр [6].

Для проведення аналізу за основу був взятий розв'язок рівняння Шредінгера для прямокутного потенціального бар'єру висотою U_0 , де параметри бар'єру задані у вигляді функції. Перехід до трикутного бар'єру було здійснено шляхом варіації товщини потенціального бар'єру x ($0 \leq x \leq a$) в залежності від кінетичної енергії електрона та напруженості електричного поля. Для цього використовувалась наступна формула:

$$U(x) = U_0 \left[1 - \frac{x}{a} \right]. \quad (1)$$

У остаточних формулах було враховано пониження висоти потенціального бар'єру за рахунок нормального ефекту Шотткі. В результаті застосування матричного методу було одержано вирази для коефіцієнтів прозорості для трьох різних випадків:

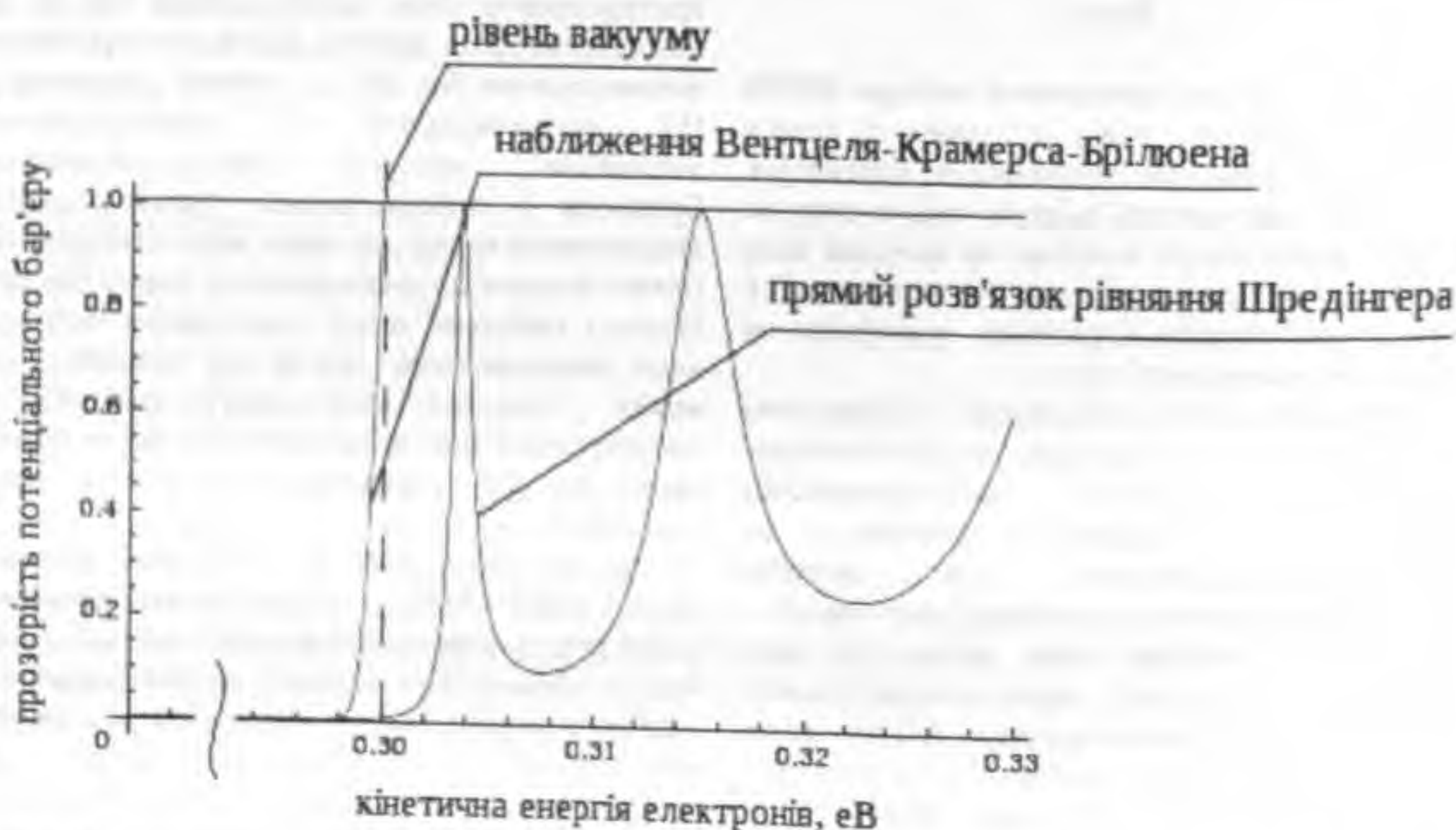


Рис. 1. Прозорість прямокутного потенціального бар'єру, як функція кінетичної енергії електронів.

а) якщо $U_0 > E$, то

$$D(E) = \frac{4k_1^2 K_2^2}{4k_1^2 K_2^2 + (k_1^2 + K_2^2) \sinh^2 K_2 x}, \quad (2)$$

де $k_1 = [2mE/\hbar^2]^{1/2}$, $K_2 = [2m(U_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$;

б) якщо $U_0 = E$, то

$$D(E = U_0) = \left[1 + \frac{mx^2 U_0}{2\hbar^2} \right]^{-1}; \quad (3)$$

в) якщо $U_0 < E$, то

$$D(E) = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 x)}, \quad (4)$$

де $k_2 = [2m(E - U_0)/\hbar^2]^{1/2}$.

При побудові фізичної моделі емісії з МПЕ з використанням квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр за основу було взято енергетичну діаграму, зображену на рис. 2.

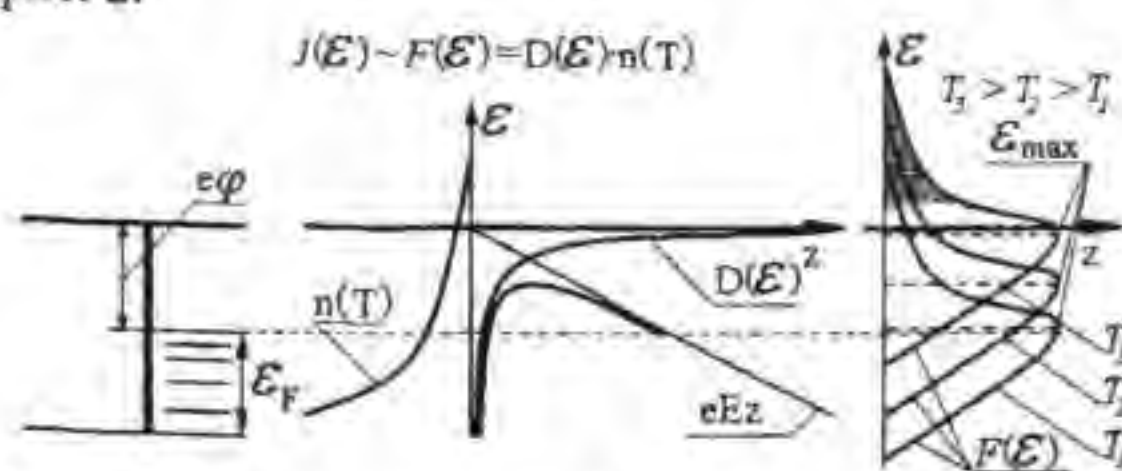


Рис. 2. Енергетична діаграма, що схематично відображає роль температури з позиції термоавтоелектронного характеру емісії досліджуваних зразків [5].

В рамках фізичної моделі емісії з МПЕ з використанням квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр було досліджено на екстремум модельну функцію

$$F(E) = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 x)} \cdot \exp\left(-\frac{\varepsilon - e\varphi}{kT}\right), \quad (5)$$

яка є добутком виразу для прозорості потенціального бар'єру трикутної форми і функції розподілу електронів за енергіями (розподіл Максвелла). Тут $k_1 = [2mE/\hbar^2]^{1/2}$,

$k_2 = [2m(E - U_0)/\hbar^2]^{1/2}$. Варто зазначити, що густина струму емісії визначається інтегралом від $F(E)$. Проте, оскільки модельна функція має різкий максимум, то в першому наближенні вважалось, що значення інтегралу в околі

максимуму дорівнює значенню самої функції. Розрахунки проводилися для металічного бар'єру з використанням таких параметрів: робота виходу $e\varphi = 2,52$ еВ, висота потенціального бар'єру $U_0 = 4,9$ еВ.

Експериментальні результати

На рис. 3 наведено результати обчислення прозорості трикутного потенціального бар'єру при напруженості електричного поля 10^5 В/м.

З рис. 3 видно, що, як і у випадку потенціального бар'єру прямокутної форми (див. рис. 1), для трикутного бар'єру його прозорість наближається до одиниці лише для електронів із певними значеннями кінетичної енергії.

Результати варіації напруженості електричного поля показали, що її збільшення при сталій температурі призводить до незначного зростання амплітуди максимуму прозорості в околі значення енергії електронів у 4,9 еВ та до перерозподілу амплітуд тонкої структури при більших значеннях енергії електронів, а енергетичне положення максимуму прозорості в околі значення енергії електронів у 4,9 еВ не змінюється.

Результати варіації температури показали, що її зростання при сталій напруженості електричного поля призводить до зростання амплітуди максимуму прозорості в околі значення енергії електронів у 4,9 еВ, зміщення його енергетичного положення у бік більших енергій та до перерозподілу амплітуд тонкої структури при більших значеннях енергії електронів.

Для числової оцінки залежності енергетичного положення максимуму концентрації електронів від температури та напруженості електричного поля модельна функція досліджувалася на екстремум та знаходились значення зсуву енергетичного положення максимуму функції відносно висоти потенціального бар'єру.

При порівнянні експериментальних результатів та результатів числової оцінки залежності енергетичного положення максимуму концентрації електронів в емітері, проведеної в рамках вдосконаленої фізичної моделі емісії з МПЕ з використанням квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр, було використано залежності значень тангенсів кутів нахилу вольт-амперних характеристик реальних МПЕ з різним матеріалом матриці. Вони були отримані при апроксимації ВАХ методом найменших квадратів

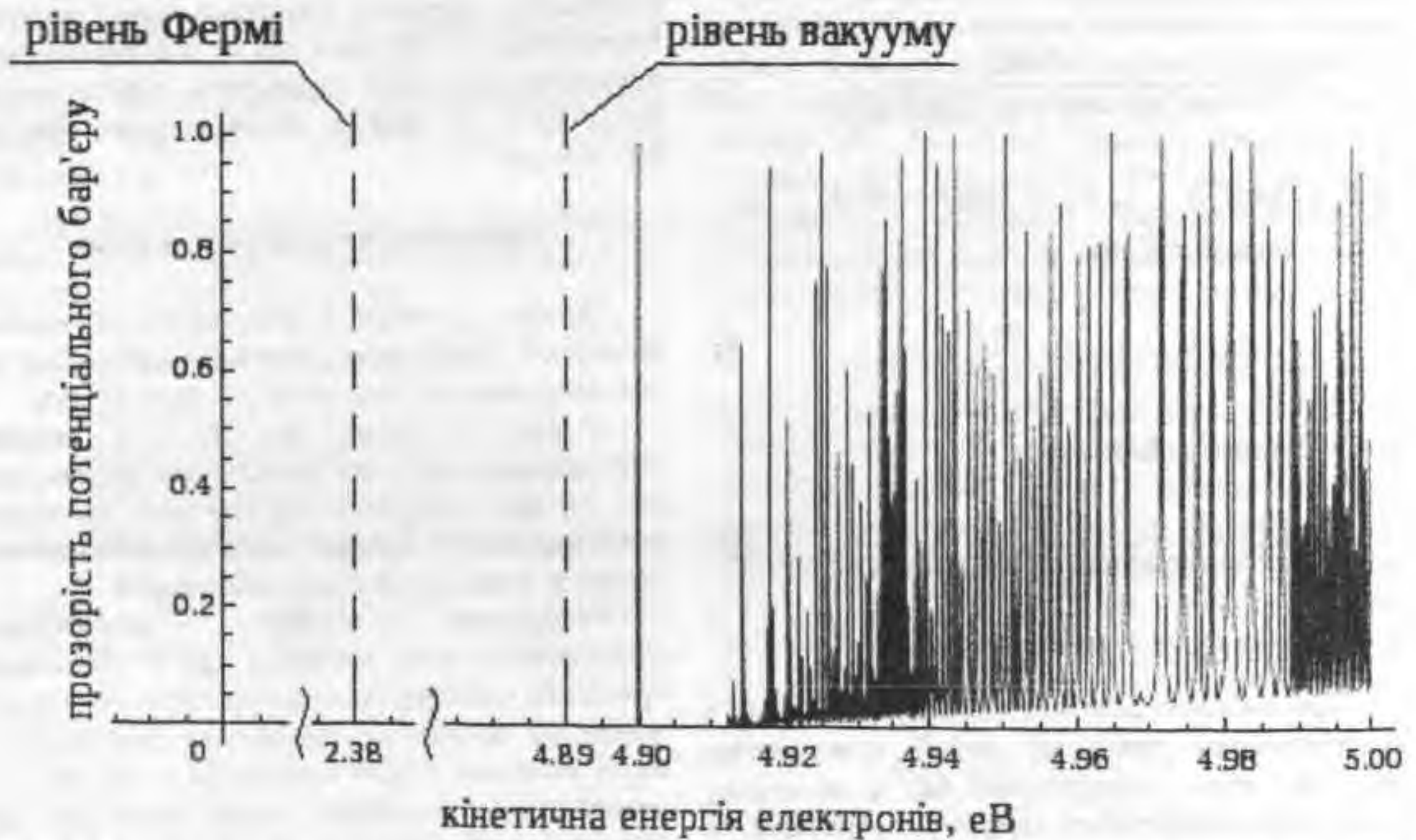


Рис. 3. Прозорість потенціального бар'єру трикутної форми, як функція кінетичної енергії електронів при напруженості електричного поля 10^5 В/м.

для різних температур зразків та при напруженості електричного поля в околі 10^5 В/м, а також при різних значеннях напруженості електричного поля та при температурі 1300 К. Для кількісної оцінки порівняння методами математичної статистики було пораховано коефіцієнт кореляції (*corell*) між експериментальними результатами та результатами числової оцінки.

Аналіз залежностей, наведених на рис. 4 – рис. 6 показує, що при сталій напруженості електричного поля результати числової оцінки зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції в залежності від температури найкращим чином узгоджуються з експериментальними даними для скандатних МПЕ з реній-вольфрамовою матрицею (рис. 4).

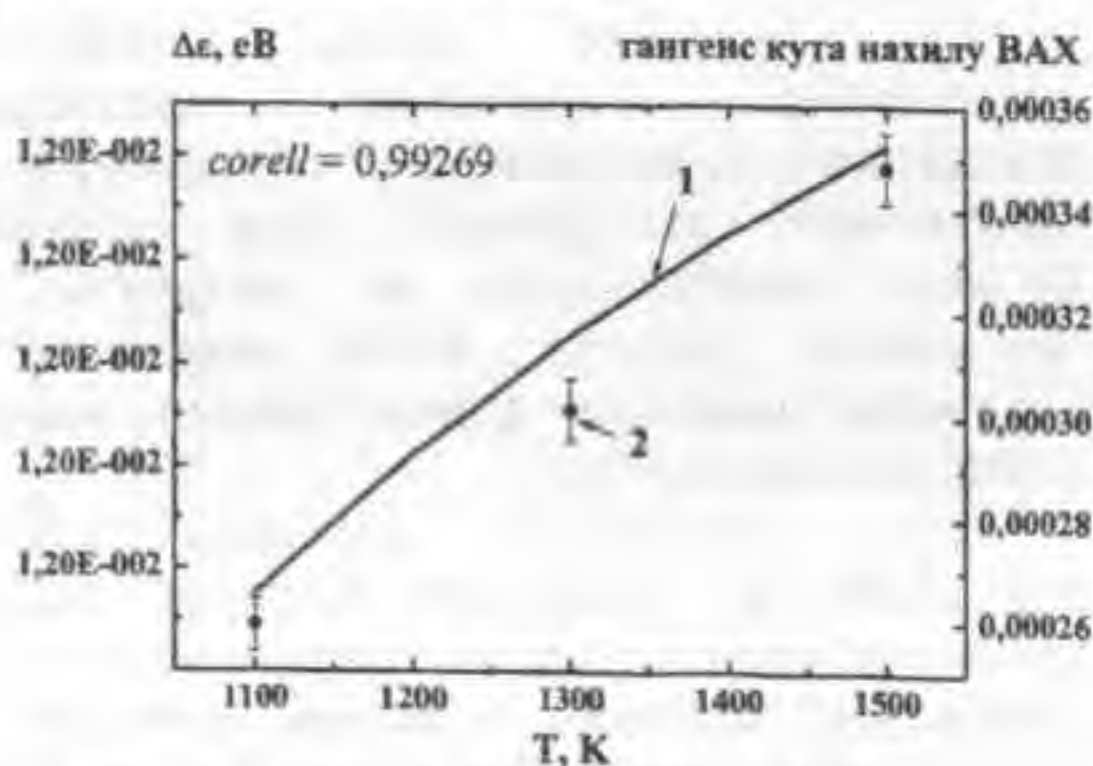


Рис. 4. Залежність зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції (1) та тангенса кута нахилу ВАХ скандатного МПЕ з реній-вольфрамовою матрицею (2) від температури при напруженості електричного поля $E=10^5$ В/м.

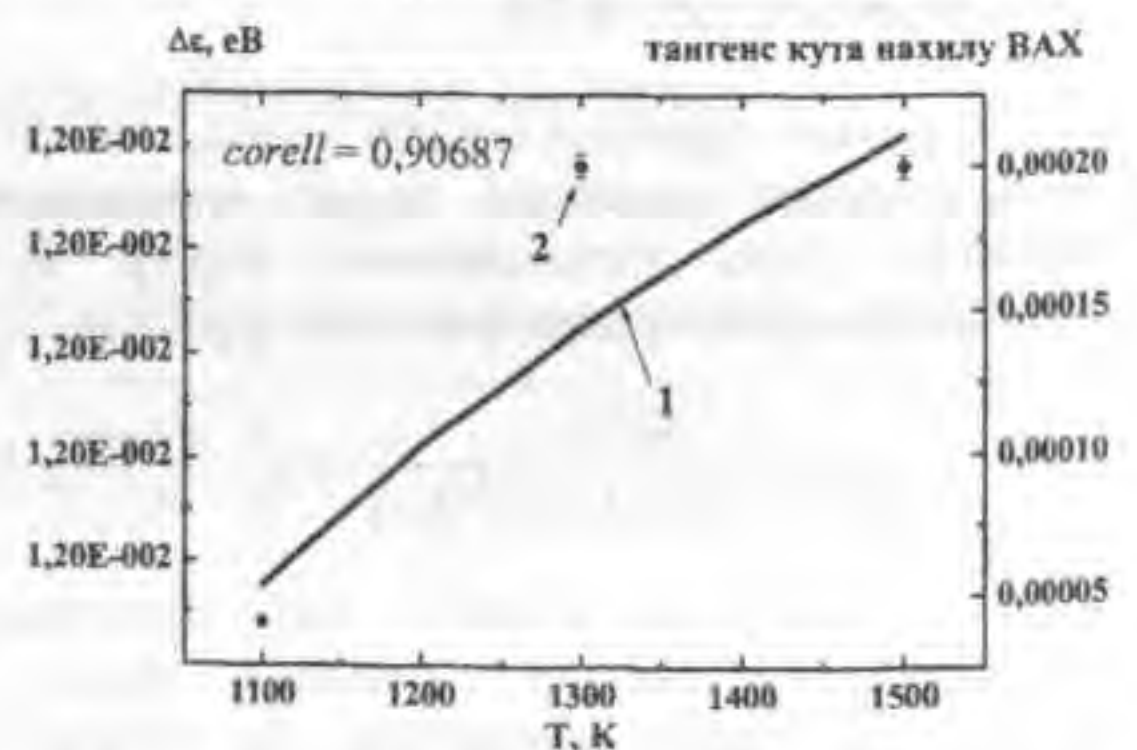


Рис. 5. Залежність зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції (1) та тангенса кута нахилу ВАХ скандатного МПЕ з вольфрамовою матрицею (2) від температури при напруженості електричного поля $E=10^5$ В/м.

Цей результат є доказом на користь висновку, зробленого в [7] про те, що у МПЕ

такого типу температура робочої поверхні дуже суттєво впливає на її склад, від чого, у свою чергу, залежить механізм впливу поля на їхню емісійну здатність (значна глибина проникнення електричного поля всередину емісійно-активної речовини).

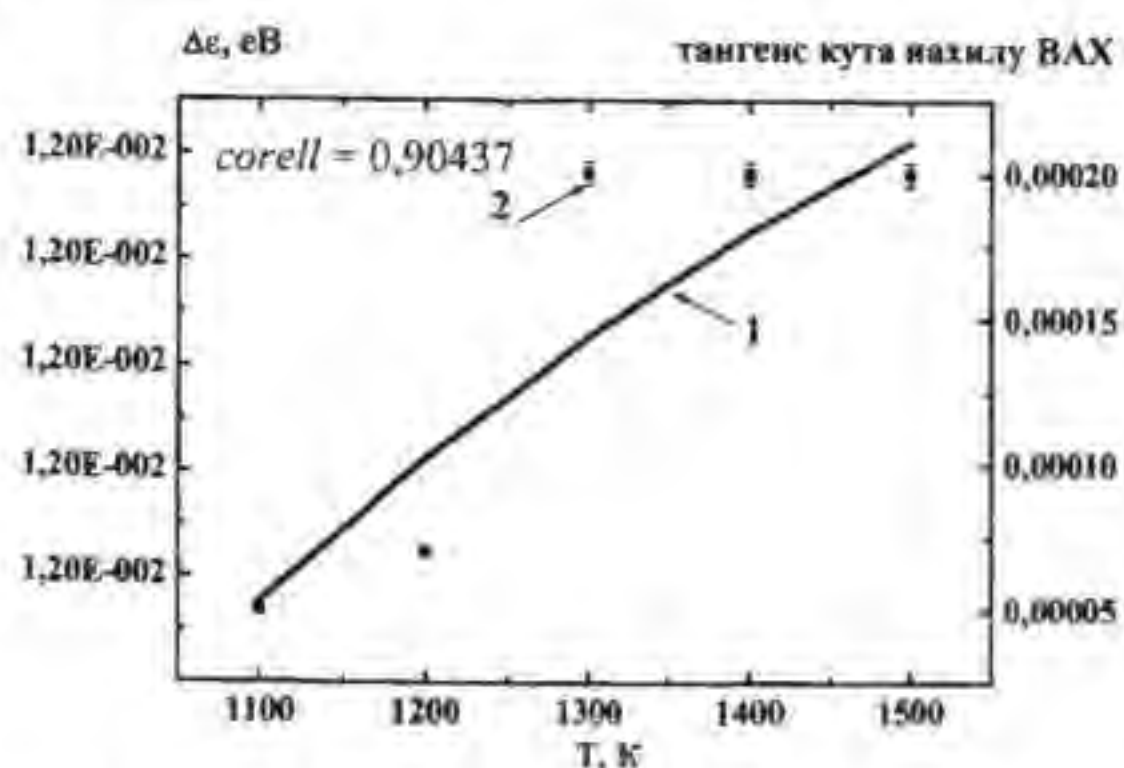


Рис. 6. Залежність зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції (1) та тангенса кута нахилу ВАХ звичайного МПЕ з вольфрамовою матрицею (2) від температури при напруженості електричного поля $E=10^5$ В/м.

У випадку емітерів із вольфрамовою матрицею подібність поведінки тангенса кута нахилу експериментальних ВАХ та майже однакові значення коефіцієнта кореляції (0.9 для звичайного МПЕ та 0.91 для скандатного) між результатами обчислень та експериментів можна розглядати, як доказ того, що у МПЕ такого типу температура робочої поверхні дуже суттєво впливає на її структуру, внаслідок чого забезпечуються високі значення геометричного коефіцієнту підсилення поля і це дозволяє електричному полю при анодних напругах 20 – 30 В помітно знижувати висоту потенціального бар'єру та зменшувати його товщину [8].

Високі значення коефіцієнтів кореляції, а також гарне якісне узгодження поведінки залежностей тангенса кута нахилу експериментальних ВАХ та зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції від напруженості електричного поля (див. рис. 8 – рис. 10) наочно демонструють сильний позитивний вплив електричного поля на емісійну здатність досліджуваних зразків при сталій температурі. Це також можна розглядати, як доказ на користь висновків щодо механізму впливу електричного поля на параметри МПЕ, зроблених в [7, 8].

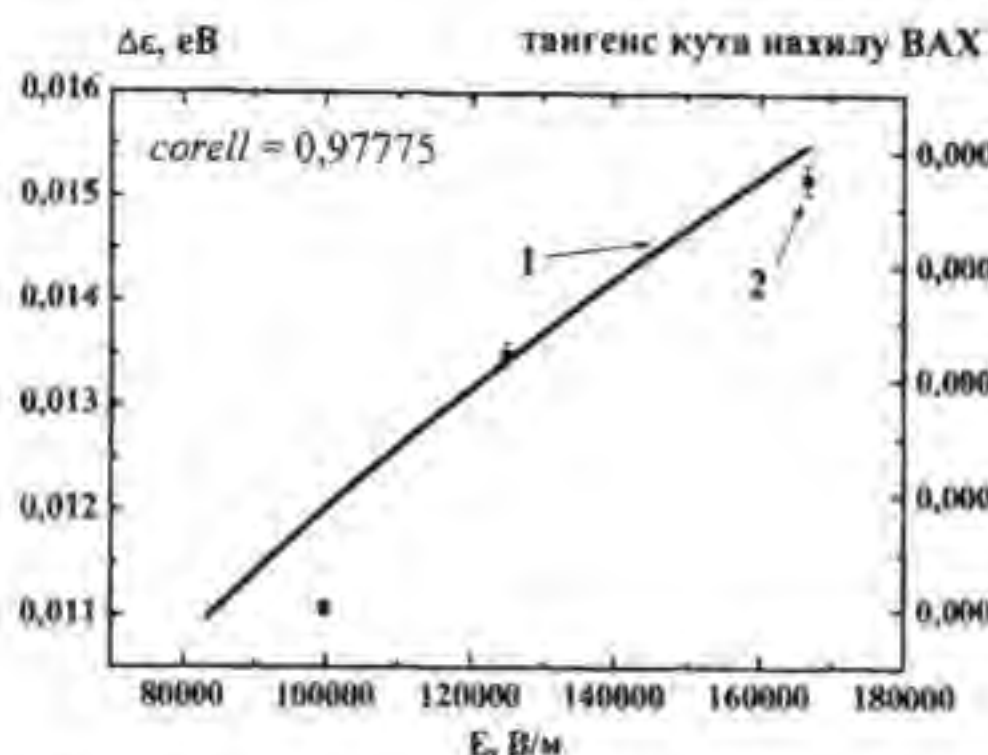


Рис. 7. Залежність зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції (1) та тангенса кута нахилу ВАХ Sc-Ba МПЕ з реній-вольфрамовою матрицею (2) від напруженості електричного поля при температурі $T=1300$ К.

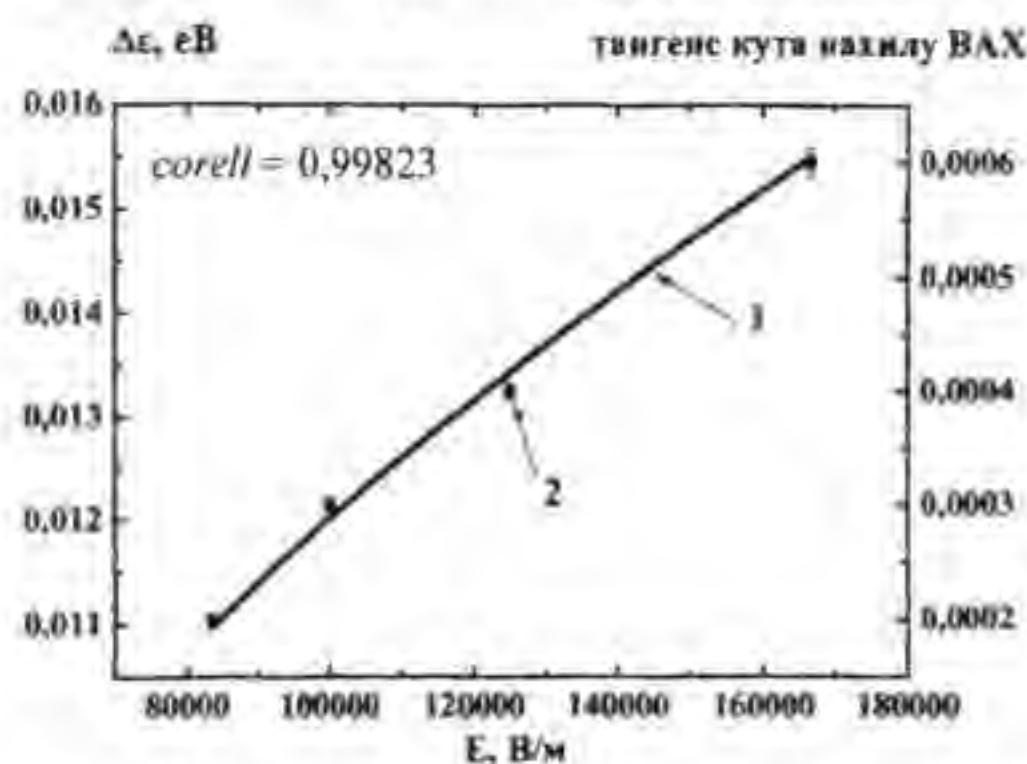


Рис. 8. Залежність зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції (1) та тангенса кута нахилу ВАХ скандатного МПЕ з вольфрамовою матрицею (2) від напруженості електричного поля при температурі $T=1300$ К.

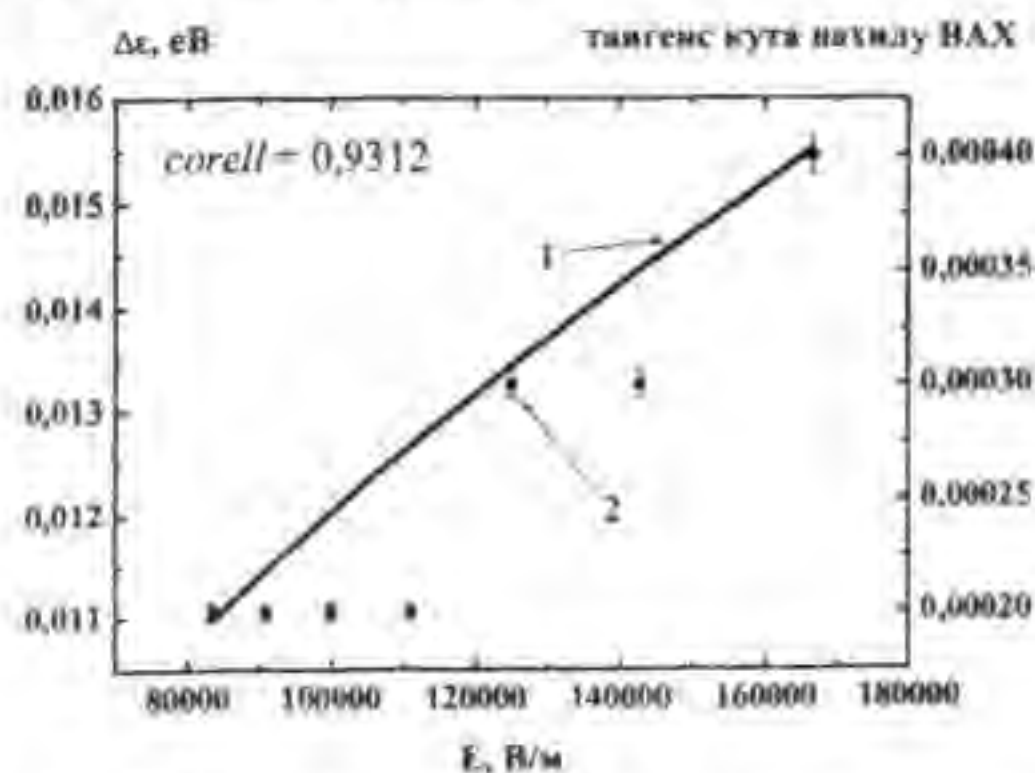


Рис. 9. Залежність зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції (1) та тангенса кута нахилу ВАХ звичайного МПЕ з вольфрамовою матрицею (2) від напруженості електричного поля при температурі $T=1300$ К.

Висновки

При використанні квантової теорії тунелювання частинки крізь потенціальний бар'єр для обчислення прозорості бар'єру трикутної форми з врахуванням ефекту Шотткі остання досягає одиниці при енергії електронів, яка перевищує значення висоти потенціального бар'єру, і, надалі, в обмеженому діапазоні енергій, має вигляд осцилюючої функції.

Результати числової оцінки зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції в залежності від температури при сталій напруженості електричного поля найкращим чином узгоджуються з експериментальними даними для скандатних МПЕ з ретій-вольфрамовою матрицею. Це свідчить, що у МПЕ такого типу температура робочої поверхні дуже суттєво впливає на її склад, від чого, у свою чергу, залежить механізм впливу поля на їхню емісійну здатність [7].

Подібність поведінки тангенса кута нахилу експериментальних ВАХ та майже однакові значення коефіцієнта кореляції між результатами обчислень та експериментів у випадку емітерів із вольфрамовою матрицею можна розглядати, як доказ того, що у МПЕ такого типу температура робочої поверхні дуже суттєво впливає на її структуру, яка зумовлює механізм впливу поля на їхню емісійну здатність [8].

Високі значення коефіцієнтів кореляції та гарне якісне узгодження поведінки залежностей тангенса кута нахилу експериментальних ВАХ досліджуваних зразків та зміщення енергетичного положення максимуму модельної функції від напруженості електричного поля для емітерів різних типів наочно демонструють сильний позитивний вплив електричного поля на емісійну здатність досліджуваних зразків при сталій температурі. Цей результат також можна розглядати, як доказ на користь висновків щодо механізму впливу електричного поля на параметри МПЕ, зроблених раніше [7, 8].

Список використаних джерел

1. G. Gartner, P. Geittner, D. Raasch, D.U. Wiechert. Supply and loss mechanism of Ba dispenser cathodes. // Appl. Surf. Sci., – 1999. – 146. – P. 22 – 30.
2. Haiqing Yuan, Xin Gu, Kexin Pan, Yiman Wang, Wei Liu, Ke Zhang, Jinshu Wang, Meiling Zhou, Ji Li. Characteristics of scandate-impregnated cathodes with sub-mikron scandia-doped matrices. // Appl. Surf. Sci. – 2005. – 251. – P. 106 – 217.
3. І.І. Бех, В.В. Ільченко, О.М. Костюкевич, О.Є. Лушкін. Вплив скандію на емісійні властивості металевопористих катодів. // Вісник Київського університету, Серія: Фіз.-мат. науки. – 2003. – 2. – С. 236 – 245.
4. Ракітін С.П., Панічкіна В.В., Гетьман О.І., Ільченко В.В., Лушкін О.Є., Бех І.І. Вивчення механізму емісії високострумівих імпрегнованих скандатних катодів. // 36. "Фундаментальні орієнтири науки. Хімія та наукові основи перспективних технологій." – К.: "Академперіодика". – 2005. – С. 224 – 238.
5. Бех І.І., Дмитришин О.А., Ільченко В.В., Лушкін О.Є., Присяжний В.В. Особливості механізму емісії скандатних металевопористих емітерів. // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат науки. – 2005. – 4. – С. 269 – 274.
6. Борисенко В.Е., Воробьева А.И., Уткина Е.А. Нанозлектроника. – М.: БИНОМ, 2009. – 223.
7. Бех І.І., Вербицька О.В., Ільченко В.В., Лушкін О.Є., Нагула П.О. Вплив електричного поля на емісійні властивості металевопористих Sc-Ba емітерів з Re-W матрицею. // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат науки. – 2008. – 4. – С. 203 – 206.
8. I.I. Bekh, O. Verbytska, V. Il'chenko, A. Lushkin, P. Nagula, V. Shcherban. The influence of the electric field on the emissions properties of the Sc-Ba dispensed emitters with the W matrix. // Вісн. Київськ. ун-ту, сер. Радіофізика і електроніка. – 2010. – № 13. – С. 7 – 9.

Надійшла до редколегії 12.10.10

УДК 537.52.533.9:537.872

Борецький В.Ф., стажист-дослідник,
Веклич А.М., канд. фіз.-мат. наук, доцент,
Затірка О.І., студент,
Телега В.М., зав. лаб. НДЛ фізичної електроніки

Властивості плазми електричної дуги, що горить у потоці аргону між мідними електродами

Методами оптичної емісійної спектроскопії досліджується плазма електродугового розряду між мідними електродами у потоці аргону. На основі експериментально одержаних результатів у припущенні локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) розраховані радіальні розподіли складових плазми. Запропоновані можливі фізичні механізми, що визначають стан плазми в різних режимах дугового розряду. Підкреслюється особлива роль ефектів перенесення випромінювання при силі струму 100 А.

Ключові слова: електрична дуга, плазма, спектроскопія, діаграми Больцмана, стан плазми.

*E-mail: immortal_rpd@ukr.net

Статтю представив д.ф.-м.н. Анісімов І.О.

1. Вступ

Дослідження фізичних процесів у низькотемпературній електродуговій плазмі є актуальними у зв'язку з широким її застосуванням у сучасних технологіях. Відомо, що властивості такої плазми суттєво залежать від наявності домішок електродного походження та сорту плазмоутворюючого газу [1, 2]. Стан електродугової плазми також залежить від величини розрядного струму. Зокрема, у випадку використання вуглекислого газу в якості плазмоутворюючого при силі струму більше 30 А можливе відхилення від ЛТР зумовлене нерівноважністю термічної дисоціації саме молекулярної суміші [3]. Іншим механізмом, відповідальним за нерівноважність плазми, може бути її неізотермічність через недостатню концентрацію електронів у розряді, чи в деякій частині його об'єму [4]. У цьому випадку говорять про "двотемпературну" модель плазми, коли газова та електронна температура помітно відрізняються між собою. Особливим випадком нерівноважності плазми може бути відхилення заселеності рівнів атомів від розподілу Больцмана [5]. У цьому випадку окремі групи рівнів можуть

V. Boretskij, probationer-contributor,
A. Veklich Ph. D., Associate Professor,
O. Zatirka, student,
V. Telega, head of R&D phys. electronics lab.

Plasma properties of electric arc between copper electrodes in argon flow

Optical emission spectroscopy investigations of electric arc discharge plasma between copper electrodes in argon flow are carried out. The radial distribution of plasma components are calculated on the base of experimentally obtained plasma parameters in the assumption of the local thermodynamic equilibrium (LTE). The probable physical mechanisms, which are responsible from the plasma state in varies modes of electric arc discharge, are widely discussed. The key role of the radiation transfer in plasma at arc current of 100 A is emphasized.

Key Words: electric arc, plasma, spectroscopy, Boltzmann plots, plasma state.

бути заселені з різною температурою "розподілу" (близькою до газової, чи електронної). Таким чином, різні фізичні механізми у різний спосіб зумовлюють відхилення цього стану від рівноважного.

Метою даної роботи є дослідження фізичних механізмів, що визначають стан плазми електродугового розряду між мідними електродами у атмосфері атомарного газу (аргону) в діапазоні струмів 3.5 – 100 А.

2. Експеримент

Дуга ініціювалася між поверхнями мідних не охолоджуваних електродів. Діаметр електродів – 6 мм, міжелектродний проміжок – 8 мм, сила струму – 3.5, 30, 50 та 100 А. Внаслідок просторової та часової нестабільності використовувався метод однократної томографічної реєстрації інтенсивностей випромінювання спектральних ліній. Досліджувалися проводилися в середньому перерізі дуги в потоці аргону 6.33 л/хв.

Радіальний розподіл електронної концентрації при силах струмів 30-100 А визначався з контуру спектральної лінії CuI 448.0 нм, домі-

нуючим механізмом розширення якої є квадратичний ефект Штарка. Вимірювання проводилися з використанням інтерферометра Фабрі-Перо [6]. Для визначення електронної концентрації при силі струму 3.5 А використовувалася абсолютна інтенсивність лінії 465.1 нм [3].

Радіальні профілі температури $T(r)$ визначалися методом діаграм Больцмана, використовуючи спектральні лінії міді та спектроскопічні константи [7].

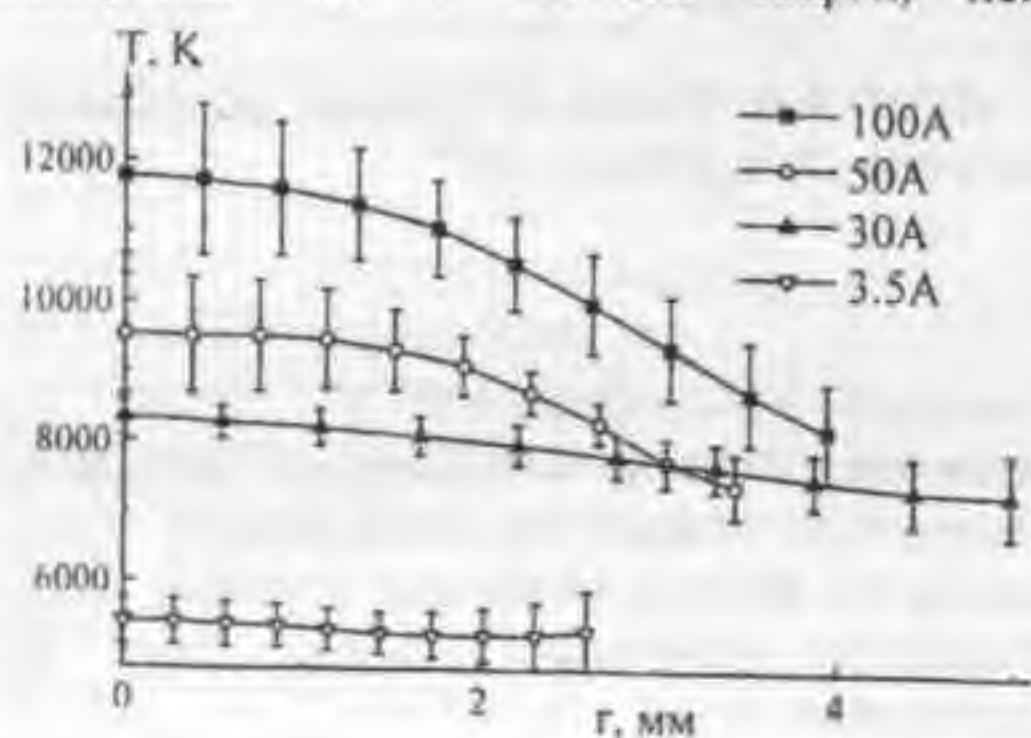
3. Результати та обговорення

На Рис.1 зображено радіальні розподіли температури та електронної концентрації для всіх режимів струму, що досліджувалися. Варто звернути увагу, що при силі струму 3.5 А температура на периферії незначно зростає, що є нефізичним. На Рис.2 показані діаграми Больцмана при силі струму 3.5 А для осьової і периферійної точки. Можна зробити висновок, що на периферії розряду реалізується нерівноважне заселення рівнів атома міді. Верхні рівні заселені за температурою ближчою до температури електронів, оскільки вільним електронам, які є носіями енергії, легше

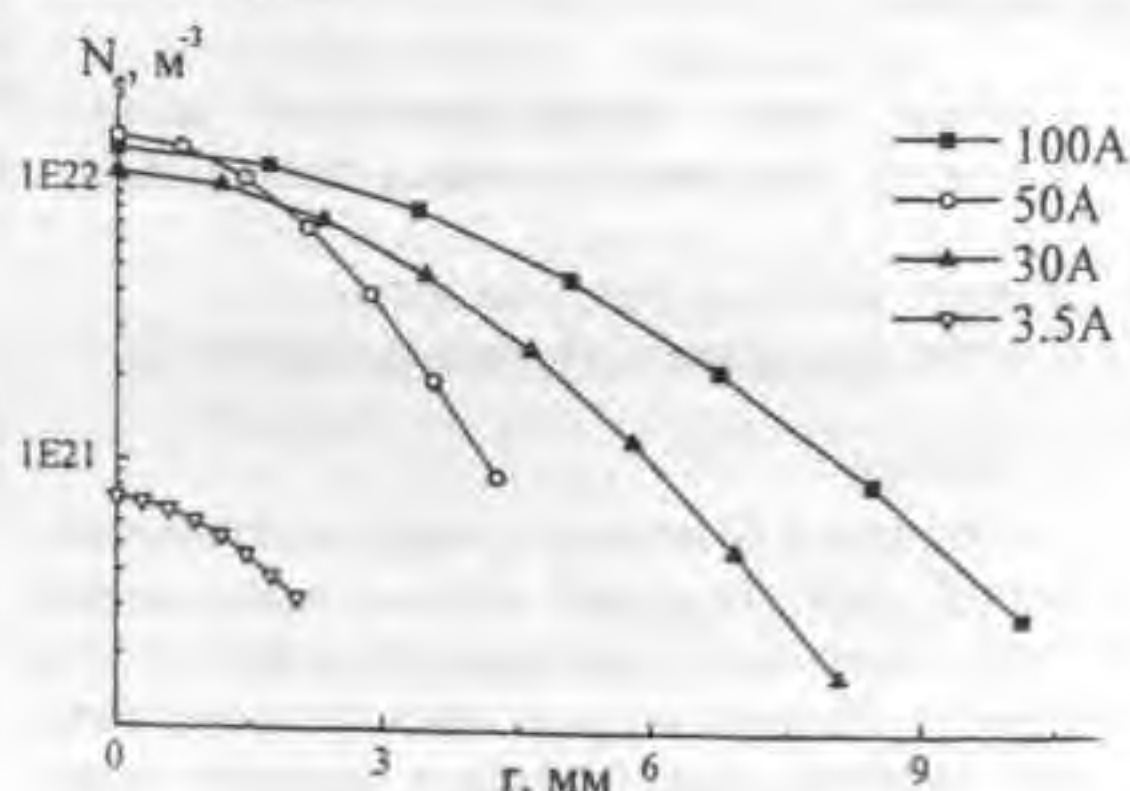
"нав'язати" температуру саме цим рівням. Нижні рівні заселені з температурою ближчою до газової. З радіальних розподілів концентрації видно, що при режимах 50 та 100 А осьові значення електронної концентрації в межах похибки збігаються, однак при силі струму 100 А дуговий канал вдвічі ширший ніж при 50 А.

Використовуючи радіальні розподіли температури та електронної концентрації, можна розрахувати компонентний склад плазми, за умови, що вона перебуває в стані ЛТР. У цьому випадку можна скористатись традиційною системою рівнянь, яка складається з рівняння Саха, для компонент, що іонізуються (мідь та аргон), рівняння електронейтральності та рівняння стану газу [3].

Розраховано рівноважний склад при силі струму 3.5 та 30 А (див. Рис. 3). Природно, що переважною компонентою у складі плазми є атоми аргону. При силі струму 3.5 А радіальний розподіл концентрації електронів та іонів міді майже повністю збігається, тобто електропровідність плазми забезпечується іонізацією міді.

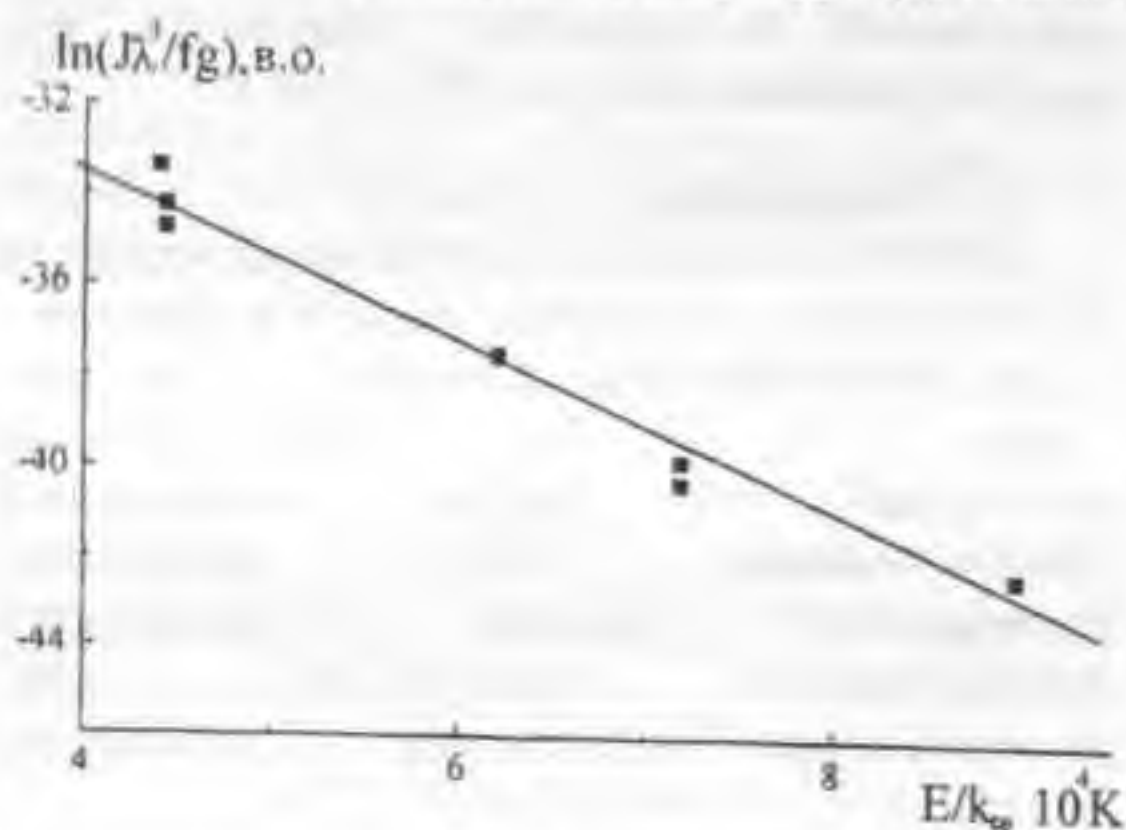


а

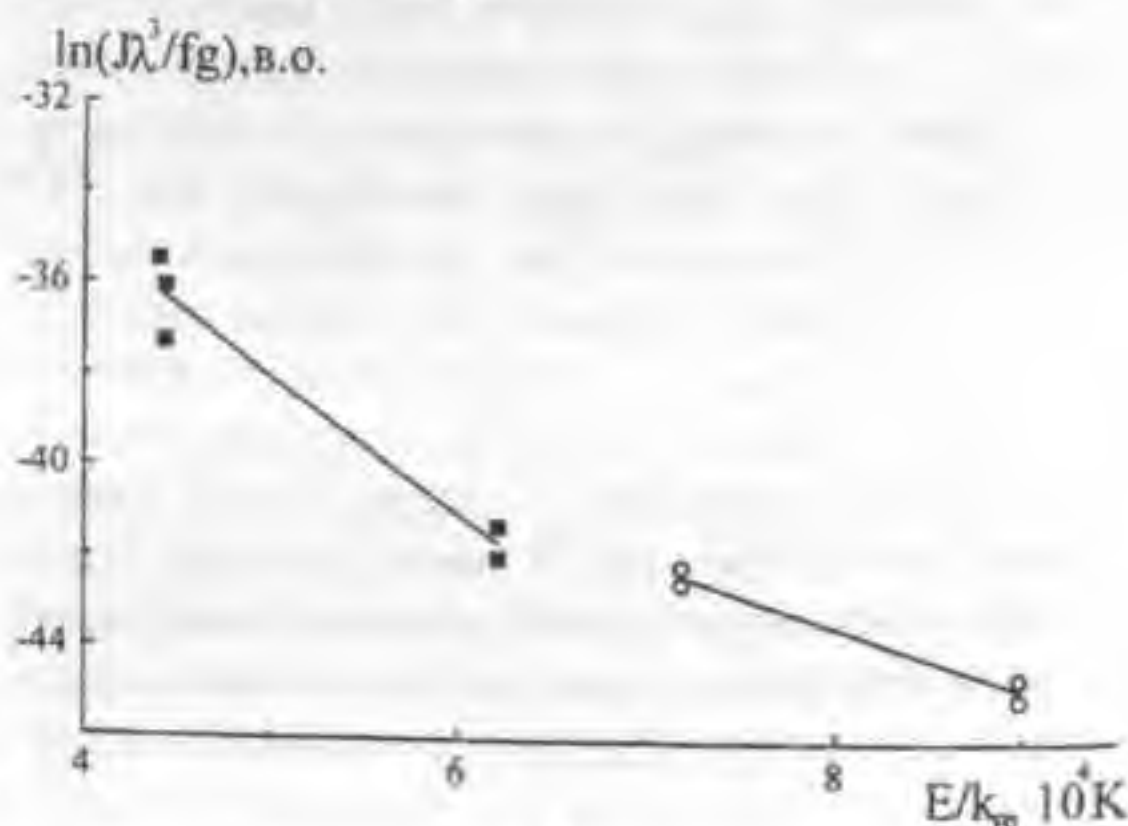


б

Рис. 1 Радіальні розподіли температури (а) та електронної концентрації (б).

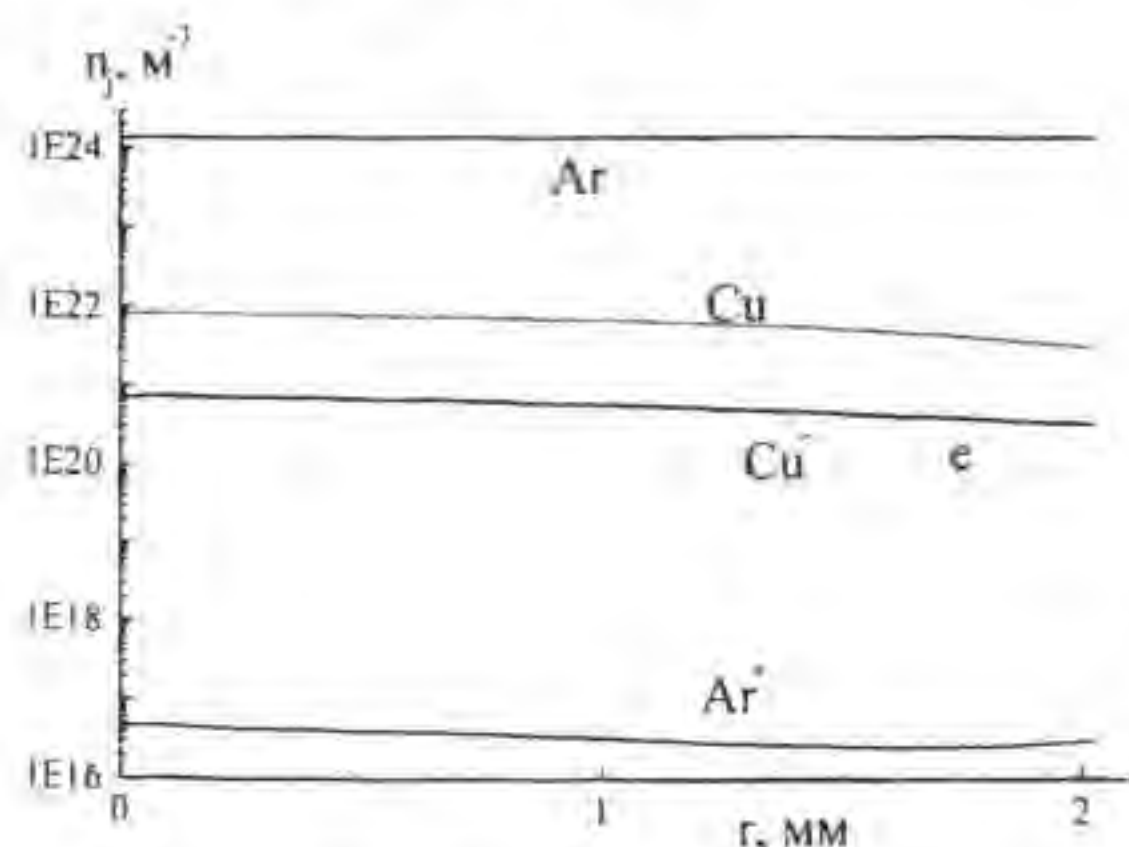


а

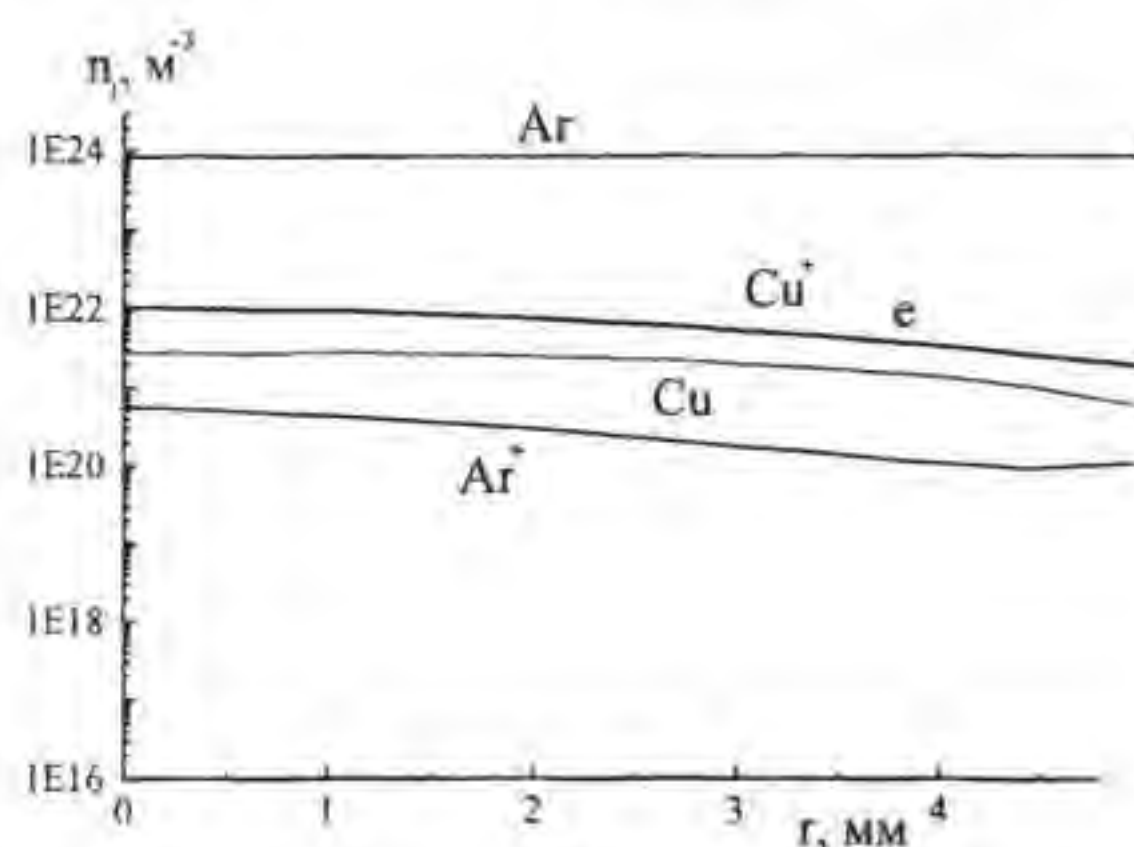


б

Рис. 2 Діаграми Больцмана при силі струму 3.5 А для осьової (а) та периферійної (б) точок.



а



б

Рис. 3 Компонентний склад плазми при силі струму 3.5 А (а) та 30 А (б).

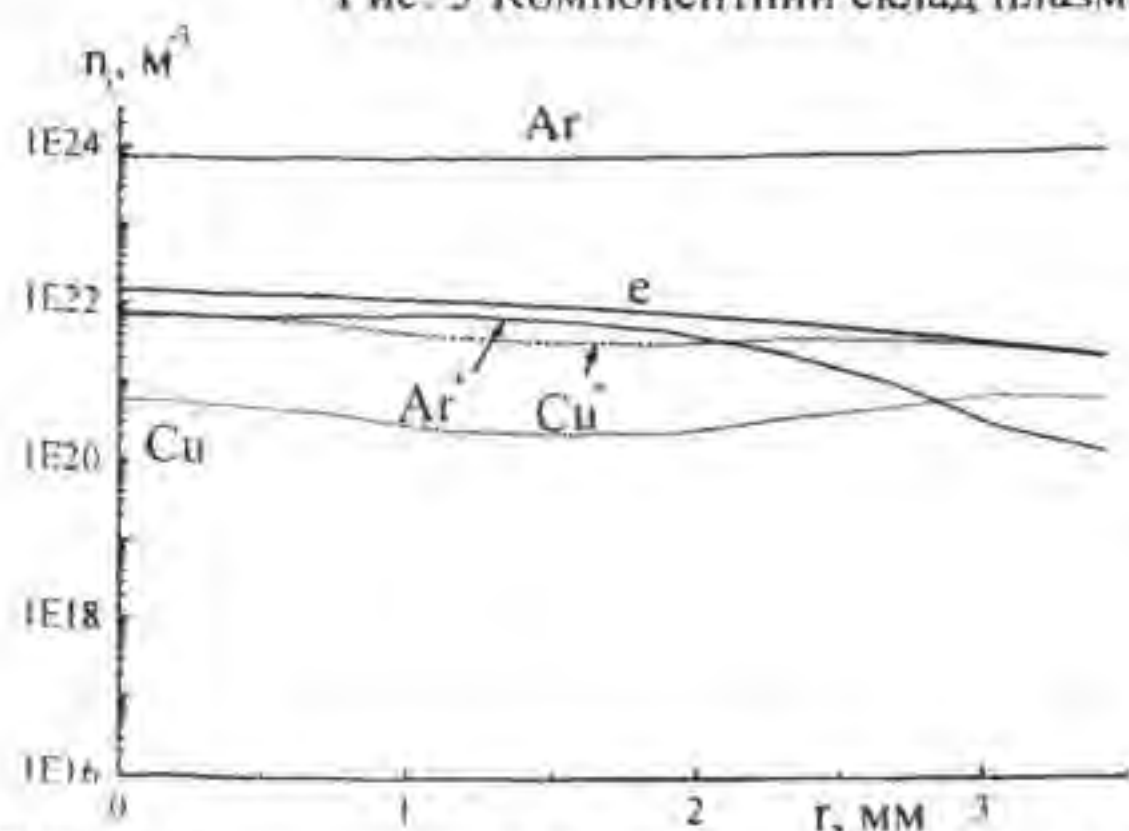


Рис. 4 Компонентний склад плазми при силі струму 50 А.

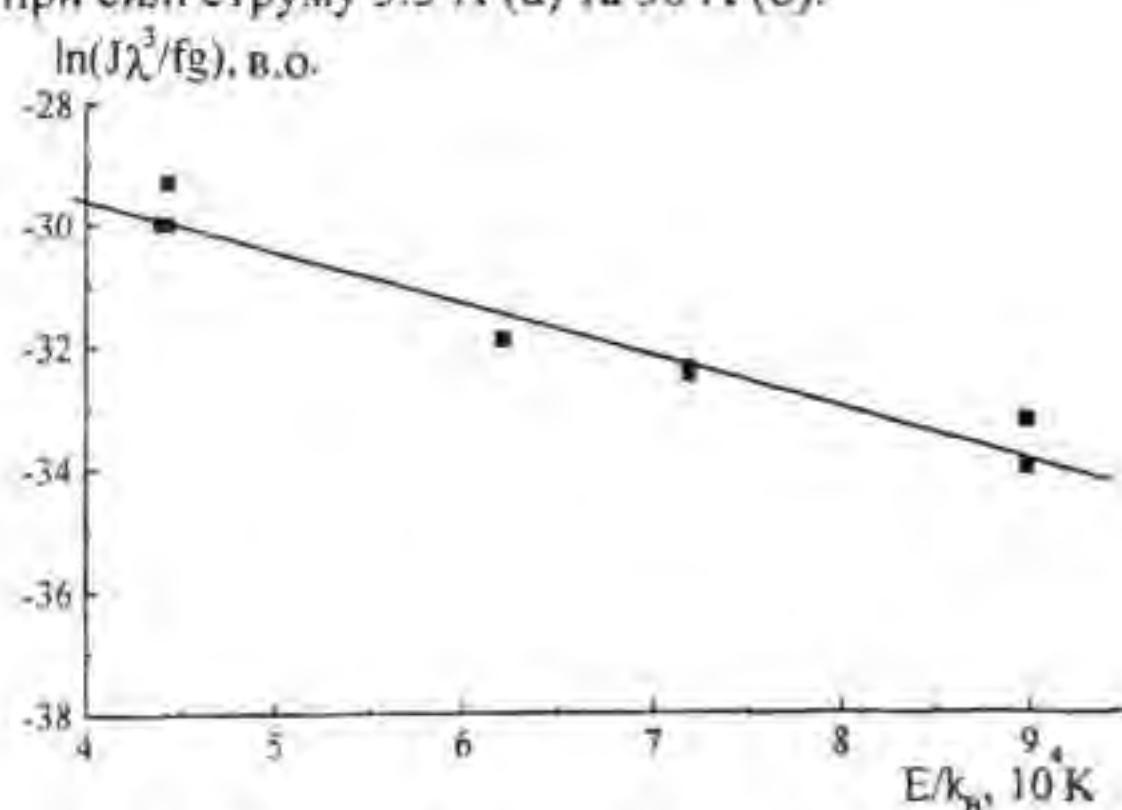


Рис. 5 Діаграма Больцмана при силі струму 100 А.

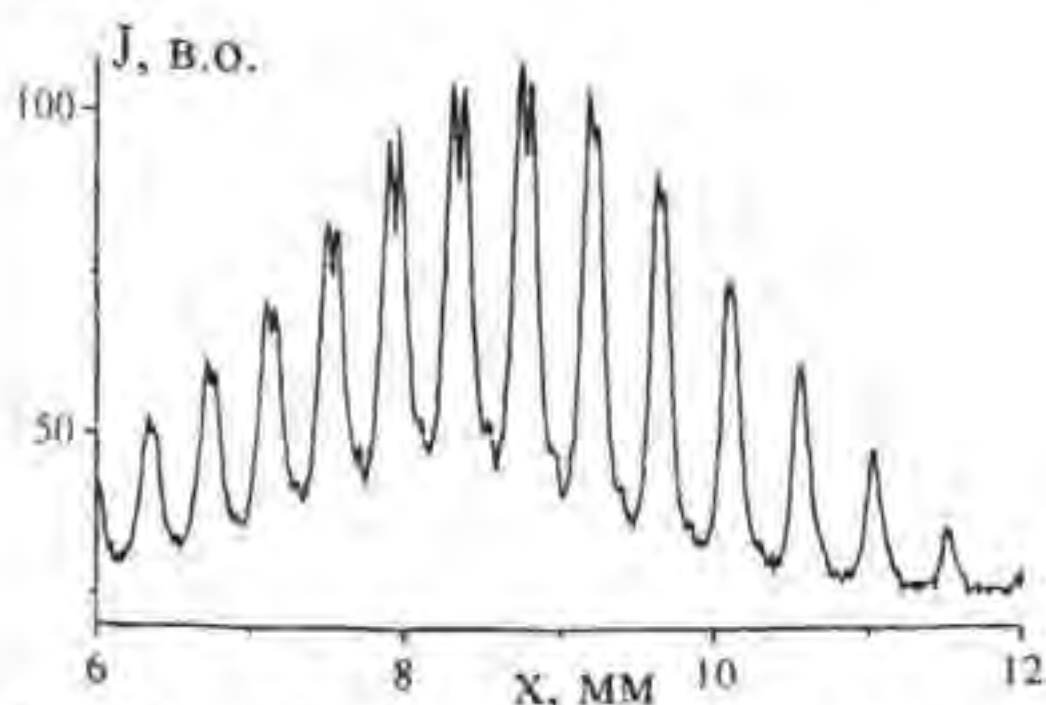


Рис. 6 Інтерферограма спектральної лінії міді CuI 510.5 нм при силі струму 100 А.

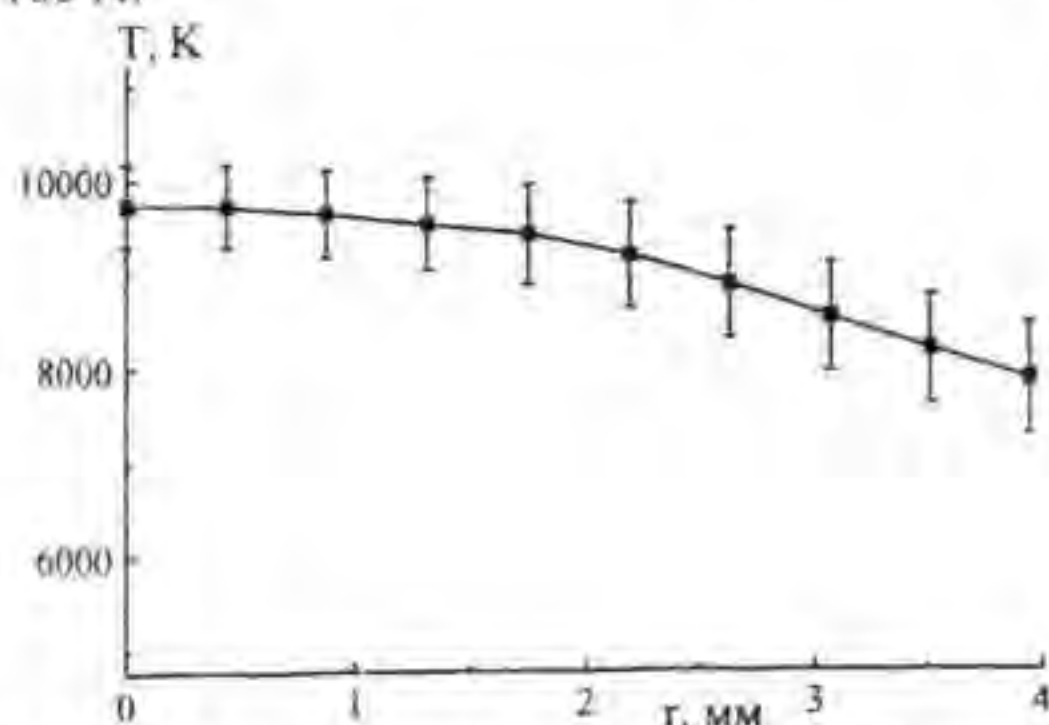


Рис. 7 Радіальний розподіл температури визначений методом відносних інтенсивностей ліній CuI 427.5-570.0 нм при силі струму 100 А.

При силі струму 30 А майже вся мідь є іонізованою, оскільки атомів міді на порядок менше, ніж іонів. Внесок аргону в електронну концентрацію є незначним, оскільки іонів аргону на два порядки менше, ніж іонів міді.

На Рис. 4 показано розрахований компонентний склад плазми при силі струму 50 А. Можна зробити висновок, що із збільшенням струму

внесок аргону і міді в електропровідність плазми вже стає співвимірним.

Дійсних розв'язків системи рівнянь, що описує рівноважний стан плазми дугового розряду силою струму 100 А, використовуючи експериментально отримані значення температури та електронної концентрації, (див. Рис. 1), немає. Причиною відхилення від рівноваги могла б бути

неізотермічність плазми.

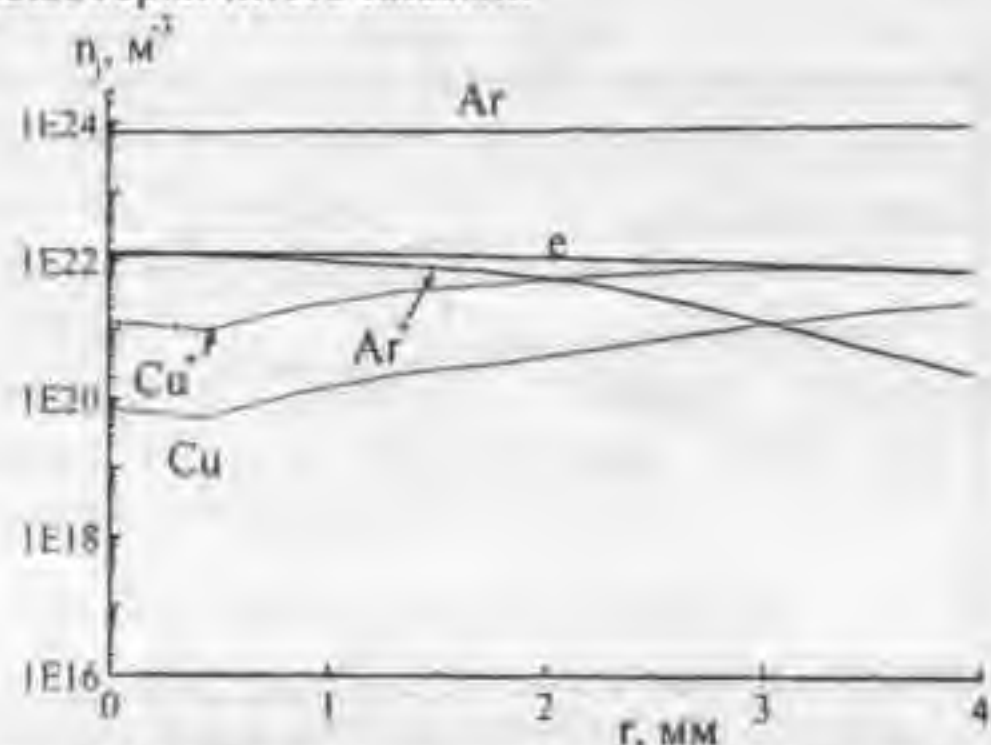


Рис. 8 Компонентний склад плазми при силі струму 100 А.

Проте, аналізуючи показану на Рис. 5 діаграму Больцмана, типову для всього перерізу дуги, можна зробити висновок, що саме у цьому випадку плазма є однотемпературною. З іншого боку відомо [8], що у високоінтенсивних дугах (більше 30 А) стає помітним вплив перенесення випромінювання. Якщо припущення про те, що плазма є оптично тонкою не реалізується, то температура, яка показана на Рис. 1 для цього режиму не є коректно визначеною через самопоглинання спектральних ліній. Дійсно, для окремих спектральних ліній (див. Рис. 6) при силі струму 100 А спостерігається ефект самообернення, що однозначно свідчить про присутність самопоглинання випромінювання. В такому випадку для визначення температури доцільно скористатися методом відносних інтенсивностей із залученням спектральних ліній, які мають найменші сили осциляторів і, відповідно, найменш чутливі до самопоглинання. Саме тому використано пару спектральних ліній CuI 427.5-570.0 нм, різниця енергій верхніх рівнів яких є значною (~ 4 eV) та сили осциляторів найменші. Одержаний таким чином радіальний розподіл температури показано на Рис. 7. Значення температури, розрахованої методом відносних інтенсивностей, суттєво менше температури, отриманої методом діаграм Больцмана (див. Рис. 1), і лише на кілька сотень К перевищує температуру при силі струму 50 А. Така поведінка температури є цілком очікуваною, оскільки осьові значення електронної концентрації у цих режимах співпадають в межах похибки. Розрахунок компонентного складу з використанням скоригованої температури (див. Рис. 7) показано на Рис. 8. Домінуючими у складі плазми є також атоми аргону. На осі розряду більший внесок в електропровідність плазми дають іони аргону. На периферії розряду вміст міді істотно

збільшується. Цей ефект спостерігався в стабілізованій стінкою дузі (наприклад, [1]) і пояснюється розділенням компонент плазми складної суміші ("demixing").

4. Висновки

Дослідженнями плазми електродугового розряду встановлено:
– внесок термічної іонізації аргону зростає зі збільшенням розрядного струму;
– зростання струму від 50 до 100 А відбувається лише за рахунок дугового каналу, значення температури та електронної концентрації плазми на осі не змінюються;
– при силі струму 100 А суттєвим механізмом є перенесення випромінювання. Для визначення температури плазми у цьому випадку є доцільним використання методу відносних інтенсивностей із залученням спектральних ліній, які є найменш чутливими до самопоглинання.

Список використаних джерел

1. *Rahal A.M., Rahhaoui B., Vacquie S.* A study of the copper vapour flux from the anode in a nitrogen arc // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1988. – 21. – P. 904-908.
2. *S. Zielinska, S. Pellerin, F.Valensi, K. Dzierzega, K.Musiol, Ch. de Izarra, and F. Briand.* Gas influence on the arc shape in MIG-MAG welding // Eur. Phys. J. Appl. Phys. – 2008. – 43. – P. 111-122.
3. *Babich I.L., Boretskij V.F., Veklich A.N.* Plasma of electric arc discharge between copper electrodes in a gas flow // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Physics. – 2008. – 14. – P. 171-173.
4. *Hsu K.S., Pfender E.* Two-temperature modeling of the free-burning, high-intensity arc // J. Appl. Phys. – 1983. – 54. – P. 4359-436
5. *Pichler G.* A study of excitation conditions in a free-burning arc between Cu electrodes with currents from 1 to 15 A // Spectrochimica Acta. – 1972. – 27B. – P. 273-286.
6. *Веклич А.М., Осідач В.Є.* Визначення електронної концентрації в плазмі електродугового розряду // Вісник Київського університету. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2004. – №2. – С. 428-435.
7. *Бабіч І.Л., Борецький В.Ф., Веклич А.М., Іванісік А.І., Семеншин Р.В., Крячко Л.О., Мінакова Р.В.* Спектроскопія плазми електродугового розряду між композитними електродами Ag-CuO / «Электрические контакты и электроды» Сб. научн. Трудов ИПМ им. Францевича НАНУ. – 2010, надіслано до друку.
8. *Lowke J.J.* Simple theory of free-burning arcs // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1979. – 12. – P. 1873-1886.

Надійшла до редколегії 02.07.10

УДК 535.37

Коротков П.А., д. ф.-м. н, проф, Кириленко Є.К.,
к. ф.-м. н, Гальченко С.М., аспірант.

**Експериментальне визначення
коефіцієнту підвищення чутливості
рентгенофлуоресцентного аналізу біопроб
після термічного експрес-озолення**

Представлено результати практичного використання методики підвищення чутливості у кількісному рентгенофлуоресцентному аналізі. Методика базується на попередньому концентруванні елементів за допомогою швидкого термічного озолання. Проаналізовано характеристичні спектри волосся та їх попелу. Розраховано коефіцієнти підвищення чутливості для важких металів та ряду інших хімічних елементів.

Ключові слова: рентгенофлуоресцентний аналіз, термічне озолання, поріг знаходження, коефіцієнт підвищення чутливості, біопроба.

*E-mail: Sveta.Galchenko@gmail.com

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Вступ

У наш час визначення реального вмісту мікроелементів у крові, сечі та волоссі є темою великої кількості наукових досліджень [9-13]. Серед існуючих методів визначення мікроелементного складу біопроб [14, 15, 18-25, 36, 38, 42] рентгенофлуоресцентний метод набуває велике практичне значення [16, 25-29, 37, 39].

До переваг рентгенофлуоресцентного аналізу треба віднести: недеструктивність, можливість вимірювання зразків без попередньої пробопідготовки, широкі діапазони елементів, що визначаються (від бору до урану) та їх кількості (від 100 до 10^{-4} мас.%), а у окремих випадках і нижче, здатність проводити одночасний аналіз цілого спектру мікроелементів, що дозволяє не помилитись в їх співвідношенні, що має велике значення при діагностиці захворювань.

Ще однією важливою перевагою даного методу є експресність проведення аналізу (декілька хвилин).

На сьогоднішній день вже існують матеріальна та методична основи для проведення

P. A. Korotkov, D. Sc., prof., E. K. Kirilenko, PhD,
S. N. Galchenko*, PhD student.

**Experimental determination of sensitivity
increase coefficient of quantitative X-ray
fluorescence analysis of bioassays after
thermal express ashing**

The practical use results of sensitivity increase technique in quantitative X-ray fluorescence analysis are presented. The technique is based on the preconcentration of elements by means of rapid thermal ashing. Spectra of hair and their ashes are analysed. Sensitivity increase coefficients for heavy metals and some other chemical elements are calculated.

Key Words: X-Ray fluorescence analysis, thermal ashing, detection limit, sensitivity increase coefficient, bioassay.

рентгенофлуоресцентного аналізу біопроб – портативні рентгенофлуоресцентні спектрометри з високою чутливістю та роздільною здатністю [45], а також гостовані та затверджені МОЗ України методики виконання вимірювань біопроб у вигляді їх природного агрегатного стану на цих приладах [43, 44].

На практиці, при наявності патологічних процесів, концентрації деяких елементів іноді знаходяться нижче порогу чутливості рентгенофлуоресцентного аналізу (менше 1-го атома на мільйон сусідів, що складають основу органічної матриці біопроби) [30, 31].

В той же час велике значення в діагностиці захворювань має визначення співвідношень між елементами [40, 41]. Так, наприклад, співвідношення Ca/K відображає зміни в щитовидній залозі, Ca/Mn – ризик захворювання на цукровий діабет, а Zn/Cu – визначає активність прогестерона або естрогена. Тому задача отримання реальних концентрацій елементів в біопробах є дуже актуальною.

Мета даної роботи дати можливість проведення уточнюючого додаткового

вимірювання біопроби, якщо концентрації деяких елементів в ній при стандартній методиці вимірювання знаходяться нижче порогу чутливості, та на прикладі такого біологічного матеріалу як людське волосся відпрацювання експрес-методики концентрування і експериментальне отримання реальних коефіцієнтів підвищення чутливості визначення мікроелементів і важких металів для обраної методики концентрування.

Вибір методики концентрування

Обширні експериментальні результати останніх років по методам концентрування та розділення окремих елементів представлені у монографіях [1-3]. Найбільш розповсюдженими з них є:

1. Екстракція (включаючи екстракційну хроматографію) [4, 33],
2. Сорбційні методи (сорбція, іонообмінна та хелатна хроматографія) [5, 34, 35],
3. Осадження та співосадження [6],
4. Електрохімічні методи [7],
5. Мокре та термічне озолання [8].

Перші чотири групи методів традиційно використовують у хімічному аналізі речовин, але вони не можуть вважатись експрес-методами.

Мокре озолання використовують як основний метод руйнації органічної матриці біологічних зразків при нагріванні їх з кислотами (HNO_3 , H_2SO_4 , HClO_4). Мокре озолання органічних речовин повинно проводитись у витяжній шафі з потужною тягою. Привабливість цього методу полягає у тому, що зберігаються всі елементи зразка, але час підготовки зразків цим методом досягає 8-10 годин, а також потребує підвищеної акуратності та постійної уваги оператора. У більшості випадків саме ця стадія вносить найвагоміший вклад у похибку результатів аналізу [8].

Усі вищезазначені методи, окрім термічного озолання, вимагають допоміжних хімічних реактивів, що у свою чергу є загрозою привнесення побічних забруднень (домішок) до досліджуваної проби.

Метод термічного озолання полягає у нагріванні органічних речовин до високої температури з доступом повітря з ціллю виділення досліджуваних елементів у вигляді стійких неорганічних сполук. Досліджувані зразки подрібнюють та вносять до порцелянових тиглів. Потім відбувається нагрівання цієї системи ($300-400^\circ\text{C}$). При цьому полум'я не повинно торкатись дна тигля. Нагрівання тигля проводять таким чином, щоб його вміст

поступово перетворювався на попіл і не було спалаху. Час озолання становить 3-4 години.

Недоліками цього методу є летючість деяких елементів або їх з'єднань (при відносно невисокій температурі частково чи повністю летять з'єднання ртуті, сірки та ін.), а також взаємодія окремих металів з матеріалами тиглів. Крім того, при термічному озоланні, важко контролювати температуру досліджуваного матеріалу безпосередньо у тиглі [8].

На практиці, при проведенні експрес-аналізу волосся рентгенофлуоресцентним методом, спочатку проводять вимірювання зразка волосся у його природному агрегатному стані, і якщо після математичної обробки отриманого спектру є підстави сумніватися в наявності якогось елемента, то бажано провести процес концентрування цієї ж проби для повторного вимірювання. Як правило, в результаті повторного вимірювання концентрованої проби, зникають усі сумніви у наявності того чи іншого елемента, а також з'являється можливість і кількісно уточнити його реальну концентрацію.

В якості експрес-методу концентрування дуже привабливим є метод швидкого озолання, коли пробу нагрівають до дуже високої температури без прямого доступу повітря.

Зразки та методика швидкого термічного озолання

У якості біологічного матеріалу використовували людське волосся.

Процес підготовки зразків і виконання вимірювань включає наступні етапи:

1. Ретельне подрібнення та перемішування 1000 мг волосся,
2. Пресування 10-ти таблеток волосся по 50 мг товщиною 1 мм і діаметром 10 мм;
3. Вимірювання кожної таблетки з двох сторін на спектрометрі енергій рентгенівського випромінювання;
4. Термічне озолання таблетки волосся;
5. Зважування попелу та пресування у таблетку;
6. Вимірювання таблетки попелу з двох сторін.

Для зважування використовували лабораторні ваги ВЛР-30 з межею зважування 250 мг та границею сумарної похибки 0.1 мг (ГОСТ 24104-99).

Пресування волосся і попелу виконували на лабораторному пресі (ГОСТ 25088-67).

Термічне озолання волосся проводили за допомогою спеціально створеної

експериментальної установки. Вона представляє собою систему з 2-х порцелянових тиглів з притертими поверхнями, фіксатора, газової горілки KOVEA та термостійкого екрану (рис. 1).

На стику, у місці контакту тиглів, немає щілин, щоб під час виконання термічного озолення запобігти прямому потраплянню полум'я на зразок та знизити прямий доступ повітря. Кожен із досліджуваних зразків волосся озолювали протягом 2 хвилин.

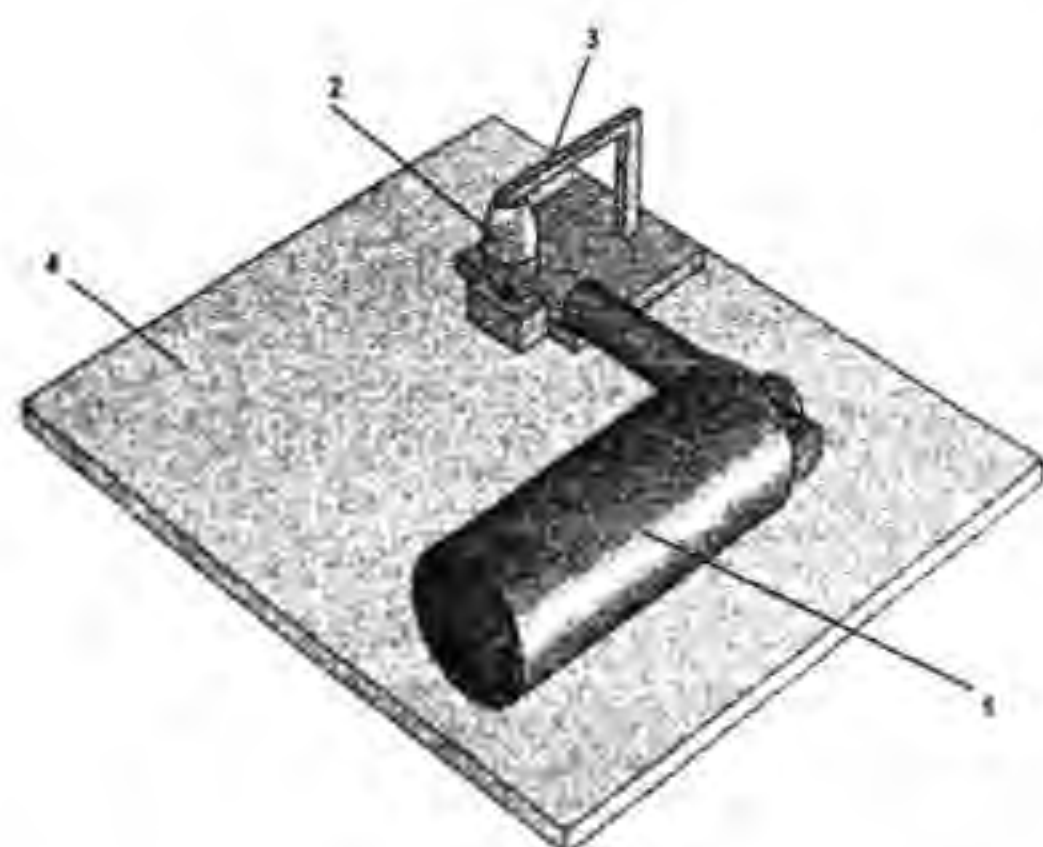


Рис. 1. Схема установки термічного експрес-озолення, 1 – газова горілка, 2 – система тиглів, 3 – фіксатор, 4 – термостійкий екран

Експериментальні результати

Для аналізу отриманих зразків було виконано серію вимірювань за допомогою спектрометра енергій рентгенівського випромінювання СЕР-01 виробництва ТОВ "ЕЛВАТЕХ" [38].

Вимірювання проводили при напрузі на W-рентгенівській трубці 40 кеВ та силі струму 18 мкА. Час набору спектру рентгенівської флуоресценції – 600 с.

У процесі досліджень проаналізовано 20 спектрів проб волосся і 20 відповідних спектрів проб попелу. Кожен зразок вимірювали з двох сторін, з метою отримання набору статистичних значень, підвищення точності вимірювань і компенсації нерівномірності розподілення елементів по об'єму зразка.

Для прикладу на рис.2. представлені спектри рентгенівської флуоресценції для зразка волосся та його попелу № 9 (X9), де добре видно, як підвищується інтенсивність аналітичних ліній хімічних елементів.

Оскільки зразки волосся виготовлялись з однієї партії, то з усіх отриманих спектрів розраховували інтенсивності аналітичних ліній хімічних елементів, їх середнє значення та похибку їх вимірювання. Для подальшого аналізу брались лише ті елементи, похибка вимірювання яких не перевищувала 30%.

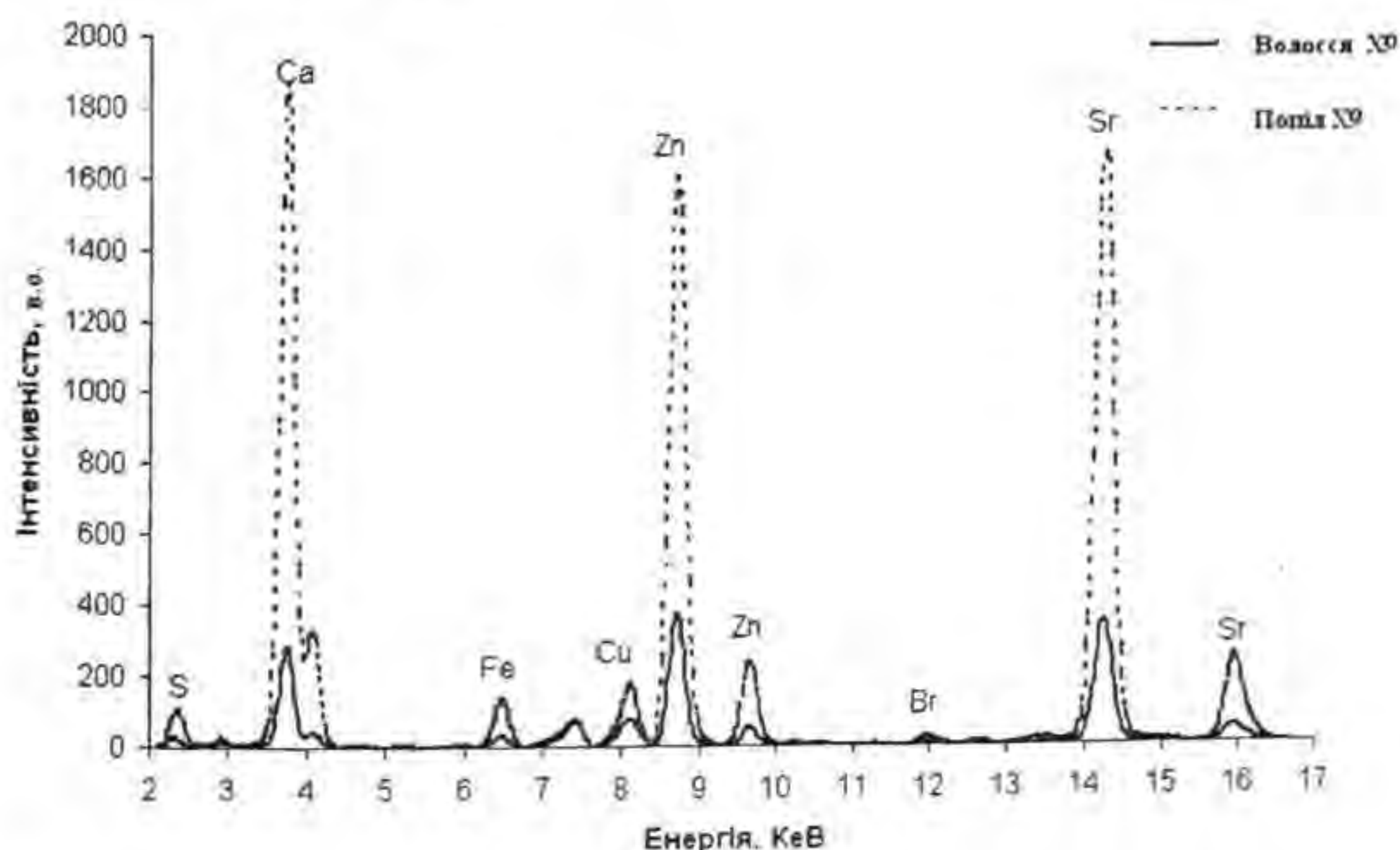


Рис. 2. Спектри зразка волосся та його попелу № 9 (X9)

Розрахунки та аналіз отриманих результатів

Для отримання коефіцієнтів підвищення чутливості використовувались два підходи. В першому підході визначались відношення порогів знаходження мінімальної концентрації (C_{min}) елементів в звичайних таблетках волосся та в таблетках їх попелу. В другому підході визначались відношення інтенсивностей аналітичних ліній елементів в таблетках з попелу до відповідних ліній в таблетках звичайного волосся.

Однією з найважливіших характеристик рентгенофлуоресцентного аналізу є поріг знаходження мінімальної концентрації (C_{min}) елементу в пробі [17], який знаходять при вимірюванні зразка з відомим вмістом елементу C за час вимірювання t (1):

$$C_{min} = \frac{K * C * \sqrt{N_b}}{(N_e - N_b) * \sqrt{t}} \quad (1)$$

де N_e та N_b – інтенсивності аналітичних ліній елементів та фону відповідно, K – коефіцієнт.

Інтенсивності аналітичних ліній розраховували за формулами (2) та (3):

$$N_e = \frac{S_e}{t} \quad (2),$$

$$N_b = \frac{S_b}{t} \quad (3),$$

де S_e – площа під піком аналітичної лінії відповідного елемента, а S_b – площа фонові підставки під аналітичною лінією.

Оскільки прилад був заздалегідь налагоджений для вимірювань концентрацій елементів в таблетках з волосся то значення C визначається автоматично і використовується як відома величина.

При визначенні C_{min} використовували $K=3$, при якому ймовірність правильного знаходження порогу рівна 50%, а ймовірність хибного достатньо мала – 14%. Отримана таким чином величина C_{min} дає можливість судити лише про наявність або відсутності елемента на даному рівні концентрації.

Коефіцієнт підвищення чутливості Y_1 розраховували за формулою (4):

$$Y_1 = \frac{C_{min}(\text{волосся})}{C_{min}(\text{nonil})} \quad (4)$$

Розраховані значення $C_{min}(\text{волосся})$ та $C_{min}(\text{nonil})$, а також їх відношення Y_1 представлені в таблиці 1.

В другому підході коефіцієнт підвищення чутливості Y_2 розраховували як відношення інтенсивностей аналітичних ліній елементів в таблетках з попелу до відповідних інтенсивностей в таблетках звичайного волосся (5):

$$Y_2 = \frac{N_a}{N_h} \quad (5),$$

де N_a – інтенсивність аналітичної лінії відповідного елемента у зразку попелу, а N_h – інтенсивність аналітичної лінії у зразку волосся. Y_2 для кожного елемента в окремо взятій пробі визначався як середнє арифметичне для обох сторін зразка (6):

$$Y_{2,a} = \frac{Y_{2,a1} + Y_{2,a2}}{2} \quad (6),$$

де $Y_{2,a1}$, $Y_{2,a2}$ – коефіцієнт підвищення чутливості i -го елемента для 1-ї і 2-ї сторони зразка.

Кінцеве значення $\langle Y_{2,a} \rangle$ для кожного елемента по всім пробам є середнім арифметичним від $Y_{2,a}$, визначеного для цього елемента у кожному зі зразків (7) (табл. 1.):

$$\langle Y_{2,a} \rangle = \frac{(Y_{2,a,x_1} + Y_{2,a,x_2} + \dots + Y_{2,a,x_N})}{N} \quad (7),$$

де $x_1, x_2, \dots, x_N$ – номер зразка, а N – кількість зразків.

Розраховані значення $\langle Y_2 \rangle$ та їх стандартне відхилення ΔY_2 представлено в таблиці 1.

З усього списку елементів, у першу чергу, слід звернути увагу на важкі метали, з наведених даних (табл. 1) бачимо, що поріг знаходження для нікелю, свинцю, хрому та кобальту зменшився у 10.53, 8.08, 7.92 та 15.35 разів відповідно.

Найвищі коефіцієнти підвищення чутливості отримано для титану (29.95) та марганцю (20.37). У той же час видно, що метод термічного озолання, як і очікувалось, непридатний для визначення сірки (0.23), ртуті (0.03), селену (0.64) та йоду (0.75).

Для перевірки запропонованої методики було проаналізовано спектр волосся з сумнівним вмістом свинцю. На рис.3 представлено спектри порівняння зразків волосся з сумнівним вмістом свинцю та його попелу.

Таблиця 1

Пороги знаходження мінімальної концентрації та середнє значення коефіцієнта підвищення чутливості по всім зразкам для елементів, які концентрувались

Елемент	$\langle Y_2 \rangle$	ΔY_2 (стандартне відхилення)	$C_{\min}$, мкг/г (волосся)	$C_{\min}$, мкг/г (попіл)	Y_1
S	0.23	0.05	50.183	110.580	0.454
K	9.23	0.13	0.281	0.071	3.959
Ca	7.49	1.44	0.185	0.036	5.139
Ti	29.95	8.22	0.027	0.014	1.929
Cr	7.92	1.65	0.026	0.010	2.600
Mn	20.37	4.37	0.012	0.003	4.000
Fe	7.25	1.12	0.011	0.003	3.667
Co	15.35	2.22	0.029	0.002	14.500
Ni	10.53	0.70	0.302	0.250	1.208
Cu	3.89	0.40	0.006	0.001	6.000
Zn	5.47	0.87	0.018	0.002	9.000
As	3.42	1.08	0.017	0.010	1.700
Se	0.64	0.08	0.003	0.022	0.137
Br	2.45	0.15	0.080	0.041	1.951
Rb	3.96	1.01	0.0023	0.0007	3.289
Sr	5.09	1.12	0.0024	0.0007	3.429
Sn	5.24	2.16	0.006	0.005	1.200
I	0.75	0.14	0.716	1.089	0.657
Ba	12.78	0.84	3.842	1.339	2.870
Ag	3.44	0.79	0.023	0.019	1.211
Hg	0.030	0.004	0.058	4.184	0.014
Pb	8.08	0.16	0.007	0.005	1.434

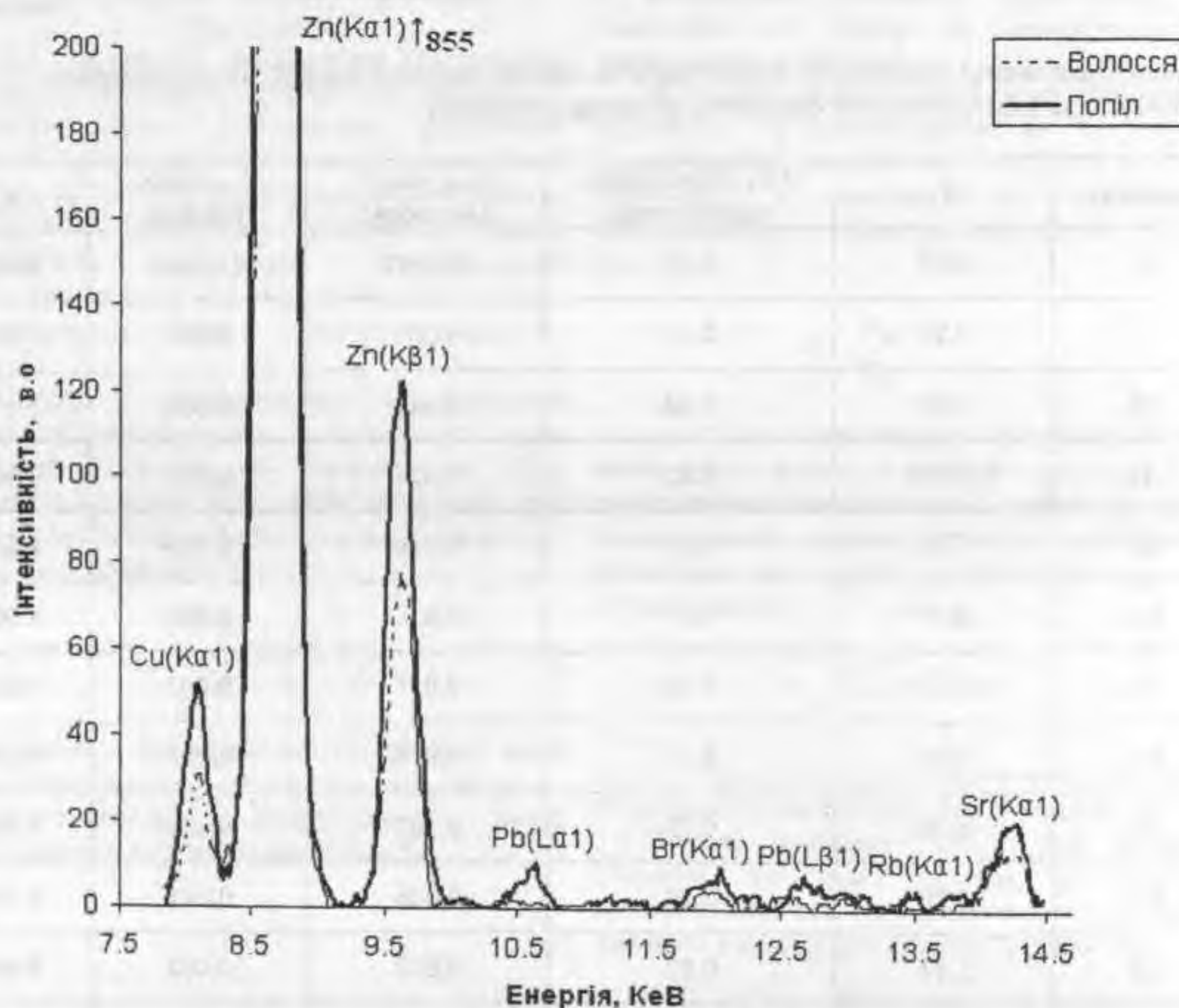


Рис. 3. Спектри зразка волосся з сумнівним вмістом свинцю та його попелу

Вміст свинцю до концентрування зразка - (0.0097 ± 0.0077) мкг/г, що відповідає похибці у 79%, а після озолення, з урахуванням коефіцієнта підвищення чутливості, отримано вміст свинцю у зразку - (0.0135 ± 0.0032) мкг/г та зменшено похибку до 23%.

Висновки

Запропоновано експрес-метод швидкого озолення біологічних проб, який дає можливість якісного визначення наявності елементів і у деяких випадках уточнити їх концентрації.

Експериментально визначено реальні коефіцієнти підвищення чутливості Y_1 , як відношення порогів знаходження мінімальної концентрації C_{min} елементів в звичайних таблетках волосся та в таблетках їх попелу.

Та Y_2 як відношення інтенсивностей аналітичних ліній елементів в таблетках з попелу до відповідних інтенсивностей в таблетках звичайного волосся.

На прикладі визначення свинцю, концентрація якого була на порозі чутливості, показано реальне зниження порогу визначення цього елементу при використанні експрес-методу швидкого озолення.

Список використаних джерел

1. Кузьмин Н. М., Золотов Ю. А., Концентрирование следов элементов. М.: Наука, 1988. – 268 с.
2. Мицуке А., Методы концентрирования микроэлементов в неорганическом анализе. М.: Химия, 1986. – 151 с.
3. Москвин Л. Н., Царицина Л. Г., Методы разделения и концентрирования в аналитической химии. Л.: Химия, 1991. – 256 с.
4. Золотов Ю. А., Экстракция в неорганическом анализе. М.: Изд-во МГУ, 1988. – 82 с.
5. Сенявин М. М., Долгонос А. М., Волощук И. Н., Ионный обмен и ионная хроматография. М.: Химия, 1993. – 221 с.

6. *Отто М.*, Современные методы аналитической химии. В. 2-х т. Пер. с нем. и под ред. Гармаша А. В.Т. 1. М.: Техносфера, 2003. – 412 с.
7. *Скорчеллетти В. В.*, Теоретическая электрохимия. Л.: Химия, 1974. – 567 с.
8. *Бок Р., (пер) Трофимова В. А.*, Методы разложения в аналитической химии. М.: Химия, 1984. – 428 с.
9. *Кудрин А. В., Громова О. А.*, Микроэлементы в иммунологии и онкологии. М.: ГЭОТАР-Медиа, 2007. – 548 с.
10. *Майкл Циммерманн*, Микроэлементы в медицине (по Бургерштайну). М.: Арнебия, 2006. – 288 с.
11. *Авцын А. П., Жаворонков А. А., Риш М. А., Строчкова Л. С.*, Микроэлементозы человека: этиологии, классификация, органопатология. М.: Медицина, 1991. – 496 с.
12. *Войнар А. И.*, Биологическая роль микроэлементов в организме животных и человека. М.: Высшая школа, 1960. – 544 с.
13. *Ноздрюхина Л. Р.*, Биологическая роль микроэлементов в организме животных и человека. М.: Наука, 1977. – 184 с.
14. *Обухов А. И., Плеханова О. И.*, Атомно-абсорбционный анализ в почвенно-биологических исследованиях. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991. – 183 с.
15. *Чудинов Э. Г.*, Атомно-эмиссионный анализ с индукционной плазмой Т. 2.. М.: ВИНТИ, 1990. – 255 с.
16. *Лосев Н. Ф., Смагунова А. Н.*, Основы рентгенофлуоресцентного анализа. М.: Химия, 1982. – 207 с.
17. *Катеман Г., Пийперс Ф. В.*, Контроль качества химического анализа. Челябинск: Металлургия, 1989 – 447 с.
18. *Петрова Н. Н., Макаренко Н. П., Качалова Т. К., Хаземова Л. А.*, Применение атомно-эмиссионного спектрального метода для определения металлов в окружающей среде и биологических материалах. // Медицина труда и промышленная экология, - 2000. - №3. – С. 35-37.
19. *Rodushkin I., Odman F., Olofson R. and Axelsson M.*, Determination of 60 elements in whole blood by sector field coupled plasma mass-spectrometry. // J. Anal. At. Spectrom., 2000. – 8, №15. – P.937-944.
20. *Begerov J., Turflend M. and Dunemman L.*, Determination of physiological palladium, platinum, iridium and gold levels in human blood using double focusing magnetic sector field inductively coupled plasma mass-spectrometry. // J. Anal. At. Spectrom., - 1997. – 9, 12. – P. 1095-1098.
21. *Elke E. M. Brouwers, Matthijs Tibben, H. Rosing, Jan H. M. Schellens and Jos. H. Beijnen.*, The application of inductively coupled plasma mass-spectrometry in clinical pharmacological oncology research. // Mass Spectrometry Reviews, - 2008. – 2, 27. – P. 67-100.
22. *Cho SY, Jang SG, Chung YS.* Human hair identification by instrumental neutron activation analysis. // J. Radional. Chem., 1988. - 229. – P.143-147.
23. *Zhuk I. I., Kist A. A.*, Human hair instrumental neutron activation analysis and medicine. // J. Radional. Chem., - 1995. – 1, 195. – P.75-81.
24. *Осипова Е. А.*, Электроаналитические методы и проблема охраны окружающей среды. // Соросовский образовательный журнал., - 2001. – 7, №2. – С. 47-54.
25. *Джапаридзе Дж. И., Шавгулидзе Н. В., Хавтаси Н. С., Енукидзе Л. Г., Харисчаривили И. З., Кириленко Е. К., Гальченко С. Н.*, Определение тяжелых металлов в волосах человека методами дифференциальной импульсной полярографии и рентгеновской флуоресцентной спектроскопии. // Український журнал з проблем медицини праці., - 2008. – 2, №14. – С.58-63.
26. *Куприянова Т. А., Лямина О. И., Семенов В. Ф.*, Методические особенности определения основных и микроэлементов в сыворотке и клетках периферической крови рентгенофлуоресцентным методом. // Клиническая лабораторная диагностика, - 1999. - №8. – С. 11-15.
27. *Magdalena Szczerbowska-Boruchowska.* X-Ray fluorescence spectroscopy as analytical tool in neurochemical research. // X-Ray Spectrometry, - 2008. – 1, 37. – P. 21-31.
28. *Федоров В. И.*, Современное состояние проблемы анализа неорганических элементов в сыворотке крови. // Клиническая лабораторная диагностика. - 2006. - №4. – С. 8-14.
29. *Фридман Г.*, Рентгеновская спектроскопия. // Успехи физических наук. - 1965. –84, вып. 4. – С. 675-705.

30. Будников Г. К. Определение следовых количеств веществ как проблема современной аналитической химии. // Соросовский Образовательный журнал. - 2000. - 6, №3. - С.45-51.
31. Кирсанов А. И., Долгодворов А. Ф., Леонтьев В. Г., Горбачева А. И., Романова В. Д., Величко Л. С., Александров В. В., Концентрация химических элементов в разных биологических средах человека. // Клиническая лабораторная диагностика. - 2001. - №3. - С. 16-20.
32. L.Bennun, E.D. Greaves and J.J. Blostein. New procedure for intensity and detection limit determination in spectral trace analysis: application for trace mercury by TXRF. // X-Ray Spectrom., - 2002. - 4, 31. - P. 289-295.
33. Розен А. М., Сафиуллина А. М., Стадии экстракционного процесса. Нетрадиционный подход. // Жур. Неорг. Химии., - 2000. - 45, №12. - С. 1086-1089.
34. Савин С. Б., Дедкова В. П., Швоева О. П., Сорбционно-спектроскопические и тест-методы определения ионов металлов на твердой фазе ионообменных материалов. // Успехи химии. - 2000. - 69, №3. - С. 203-213.
35. Данилин Л. Д., Жмайло В. В., Морозов А. П., Назаров В. В., Пилипенко Н. В., Чулков В. В., Фунин В. И. Ионообменные тонкопленочные сорбенты для концентрирования элементов в рентгенофлуоресцентном анализе. // Рос. Хим. Ж. - 2001. - XLV, №5-6. - С. 64-72.
36. Jackson K. W., Qiao H. Atomic absorption, atomic emission, and flame emission spectrometry. // Anal. Chemistry. - 1992. - 12, 64. - P. 50-66.
37. Baranowska I, Barchanski L., Bak M., Smolec B., Mzyk Z., X-Ray fluorescence spectrometry in multielemental analysis of hair and teeth. // Polish Journal of Environmental Studies. - 2004. - 13, 6. - P. 639-646.
38. Batzevich V. A., Hair trace elements analysis in human ecology studies. // Sci. Total. Environm. - 1995. - 164, 2. - P. 89-98.
39. Raghavaiah C. V., Chandrasekhar Rao M. V. S., Sree Krishna Murthy G., Varaprasad N. V. S., Ramana Rao P. V., Sastry D. L. Determination of zinc in human head hair using energy-dispersive X-ray fluorescence spectrometry. // X-ray Spectrometry. - 1996. - 25, 3. - P. 123-124.
40. Macpherson A., Bacso J., Relationship of hair calcium concentration to incidence of coronary heart disease. // Sci. Total Environm. - 2000. - 225, 1-3. P. 11-19.
41. Kolmogorov Y., Kovaleva V., Gonchar A., Analysis of trace elements in scalp hair of healthy people, hyperplasia and breast cancer patients with XRF method. // Nucl. Instr. Meth. Section A. - 2000. - 448, 1-2. - P. 457-460.
42. Bermejo-Barrera P., Moreda-Pineiro A., Moreda-Pineiro J., Bermejo-Barrera A., Comparative study on the use of Ir, W and Zr-coated graphite tubes for the determination of chromium in slurries of human scalp hair by electrothermal atomic absorption spectrometry. // Fresenius J. Anal. Chem.. - 1998. - 360, 6. - P. 712-716.
43. Методика виконання вимірювань вмісту хімічних елементів в плазмі крові рентгенофлуоресцентним методом. № 081/12-0468-07 від 12.10.2007.
44. Методика виконання вимірювань масової частки хімічних елементів у волоссі рентгенофлуоресцентним методом. № 081/12-4502-00 від 21.07.2000.
45. Сертификат утверждения типа средств измерительной техники № UA-M1/1p-971-2009 (от 15.04.2009).

Надійшла до редколегії 3.09.2010.

УДК 621.315.592

Лисоченко С.В*, к.ф.-м.н., Чирчик С.В., к.ф.-м.н

Метод визначення рекомбінаційних параметрів в технологічних пластинах Si.

У роботі запропоновано підхід по визначенню рекомбінаційних параметрів з одного виміру у пластинах Si, таких як: швидкість поверхневої рекомбінації, «ефективний» і «об'ємний» час життя носіїв заряду. В основі методу лежить інжекція носіїв заряду шляхом імпульсної засвітки локальної області світлом з області фундаментального поглинання напівпровідника і вимірювання часової залежності зміни концентрації нерівноважних носіїв заряду. Метод тестовано у виробничих умовах на технологічних пластинах кремнію і може використовуватись для якісного контролю у процесі виготовлення сонячних елементів.

Ключові слова: рекомбінаційні параметри, поверхнева рекомбінація, пластини Si.

S. V. Lysochenko, Ph.D., S.V. Chyrchik, Ph.D.

Method of determining the recombination parameters of the processing Si wafers.

The paper presents a technique to determine recombination parameters from one measurement of Si wafers, such as: surface recombination velocity, "effective" and "bulk" the lifetime of charge carriers. The method is injections of charge carriers by pulsed light illumination local area from the region of fundamental absorption of the semiconductor and measuring the time dependence changes in the concentration of nonequilibrium charge carriers. The method tested in production conditions at process silicon wafers and can be used for quality control during manufacturing of solar cells.

Key words: recombination parameters, surface recombination, Si plates.

*E-mail: lys@mail.univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

Вступ

Проблема зменшення поверхневої рекомбінації була і залишається однією з основних в процесі виробництва пластин кремнію і мікроелектронних виробів на їх основі. Швидкість поверхневої рекомбінації може на декілька порядків перевищувати об'ємну і тим самим визначальним чином впливати на якість напівпровідникових приладів. Це є особливо важливим при зменшенні розмірів електронних елементів, а також у випадку коли генераційно-рекомбінаційні процеси і перенос заряду відбуваються в тонкому приповерхневому шарі пластин, наприклад в сонячних елементах (СЕ). Тому задача виділення частини рекомбінаційних процесів, що проходять на поверхні напівпровідника, була і залишається однією з основних в роботах спрямованих на поліпшення характеристик сонячних елементів та інших мікроелектронних структур.

Для розробки ефективних методів зменшення швидкості поверхневої рекомбінації необхідне глибоке розуміння фізичних механізмів її формування. Тільки чітке

відокремлення понять «об'ємної» і «поверхневої» рекомбінації дозволяють оптимізувати технологічні процеси на основних стадіях виробництва сонячних елементів.

Існує велика кількість методик по вивченню рекомбінаційних параметрів в напівпровідниках [1,2,4,5,7-10]. Майже усі нестационарні методи математично базуються на розв'язанні одномірного рівняння неперервності з відповідними граничними умовами в застосуванні до збудженої монохроматичним випромінюванням пластини напівпровідника.

Запропонований в нашій роботі підхід по вимірюванню рекомбінаційних параметрів базується на тому, що початкова частина кінетики зміни концентрації нерівноважних носіїв заряду від часу, в основному, визначається рекомбінаційними властивостями поверхні, а кінцева – як поверхнею, так і об'ємом. Процедура вимірювань включає визначення швидкості поверхневої рекомбінації за початковою ділянкою кінетики з подальшим розрахунком «об'ємного» часу життя за відомою величиною «ефективного» часу життя, що визначається по кінцевій ділянці [1, 2,5].

Теоретичні основи методу

Виходячи з рівняння неперервності застосованого до напівнескінченного напівпровідникового зразка, що освітлюється

імпульсом монохроматичного світла, можна показати, що після припинення освітлення часова залежність спаду повної концентрації генерованих світлом вільних носіїв описується формулами (1)-(4) [5]:

$$\Delta n_{tot}(t) = \sum_k B_k b_k \exp\left(-\left(\frac{1}{\tau_V} + a_k^2 D\right)t\right) \frac{\sin(z_k)}{z_k} \quad (1)$$

$$z_k = \frac{a_k d}{2}, \quad b_k = -\frac{Da_k \cos(z_k) + s \sin(z_k)}{Da_k \sin(z_k) - s \cos(z_k)} B_k, \quad (2)$$

де $k=1, 2, \dots, \infty$, D – коефіцієнт дифузії носіїв заряду у напівпровіднику, s – швидкість поверхневої рекомбінації, τ_V – об'ємний час

життя. Константи a_k визначаються з (2), яке отримане з граничних умов для рівняння неперервності.

$$a_k d = 2 \arctg\left(\frac{s}{Da_k}\right) + k\pi \quad (3)$$

Коефіцієнти B_k визначаються з початкових умов, що являє собою початковий розподіл концентрації фотогенерованих світлом носіїв з

врахуванням багаторазового відбивання від обох граней зразка ($\Delta n_{tot}(x, t=0)$):

$$B_k = \frac{Ca_k}{\left(b_k^2 (a_k d + \sin(a_k d)) + (a_k d - \sin(a_k d))\right) \cdot (\alpha^2 + a_k^2)} \times \\ \times (b_k \left(\cos(z_k) \sinh\left(\frac{\alpha d}{2}\right) + \frac{a_k}{\alpha} \sin(z_k) \cosh\left(\frac{\alpha d}{2}\right)\right) \cdot (1 + R \cdot \exp(-\alpha d)) + \\ + \left(\frac{a_k}{\alpha} \cos(z_k) \sinh\left(\frac{\alpha d}{2}\right) - \sin(z_k) \cosh\left(\frac{\alpha d}{2}\right)\right) \cdot (1 - R \cdot \exp(-\alpha d))) \quad (4)$$

де α – коефіцієнт поглинання збуджуючого світла на довжині хвилі λ , R – коефіцієнт відбивання збуджуючого світла від поверхні напівпровідника, C – константа, що визначається потужністю випромінювання збуджуючого джерела (значення константи C не є необхідним для визначення рекомбінаційних параметрів).

Залежність повного числа фотогенерованих носіїв від часу (1) складається з нескінченного числа доданків, кожен з яких являє собою експоненціально-спадну функцію. З аналізу рівняння (3) випливає, що при зростанні номера k , величина констант a_k швидко зростає. Це в свою чергу означає, що при зростанні часу t , впливом доданків з великими значеннями k можна знехтувати. Таким чином, в початкову частину залежності (1) вносять вклад усі експоненціальні доданки, тоді як при $t \rightarrow \infty$ залежність може бути представлена однією

експонентою з постійною часу, яка являє собою ефективний час життя носіїв заряду τ_{eff} .

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_V} + a_1^2 D \quad (5)$$

У напівлогарифмічному масштабі кінцева область залежності (1) буде лінійною (рис. 1). Це дає можливість визначати ефективний час життя за часовою залежністю зміни числа фотогенерованих носіїв заряду, яка при низьких рівнях збудження лінійно пов'язана з величиною потужності ΔU відбитої (пройденої) НВЧ хвилі (див. нижче). Це дає можливість визначати ефективний час життя за залежністю $\Delta U(t)$, що вимірюється. Ефективний час життя в пластинах Si визначається за нахилом прямої, яка являє собою лінійну область отриманої залежності $\Delta U(t)$, що побудована в напівлогарифмічному масштабі:

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = - \frac{\ln(\Delta U(t_1)) - \ln(\Delta U(t_2))}{t_1 - t_2} \quad (6)$$

Величина відрізка δ (рис.1), що відтинає на осі ординат пряма, екстраполююча лінійну кінцеву область нормованої залежності (1) в напівлогарифмічному масштабі, представляється у вигляді:

$$\delta = const + \ln \left(\frac{B_1 b_1 \frac{\sin(z_1)}{z_1}}{\sum_k B_k b_k \frac{\sin(z_k)}{z_k}} \right) \quad (7)$$

Важливим наслідком що випливає з (7) є те, що δ не залежить від об'ємного часу життя, а є функцією від s . За відомими параметрами напівпровідника, такими як: коефіцієнт дифузії D , товщина d , коефіцієнт поглинання збуджуючого світла $\alpha(\lambda)$, з формул (1)-(4) можна розрахувати функцію $s(\delta)$ (кожному значенню s відповідає своє значення δ). Це дає можливість визначати швидкість поверхневої рекомбінації за залежністю $\Delta U(t)$, що вимірюється і чисельно розрахованою залежністю $s(\delta)$. Швидкість поверхневої рекомбінації s визначають за величиною відрізка δ , що відсікає на осі ординат пряма екстраполююча лінійну область отриманої залежності $\Delta U(t)$, побудованої в напівлогарифмічному масштабі.

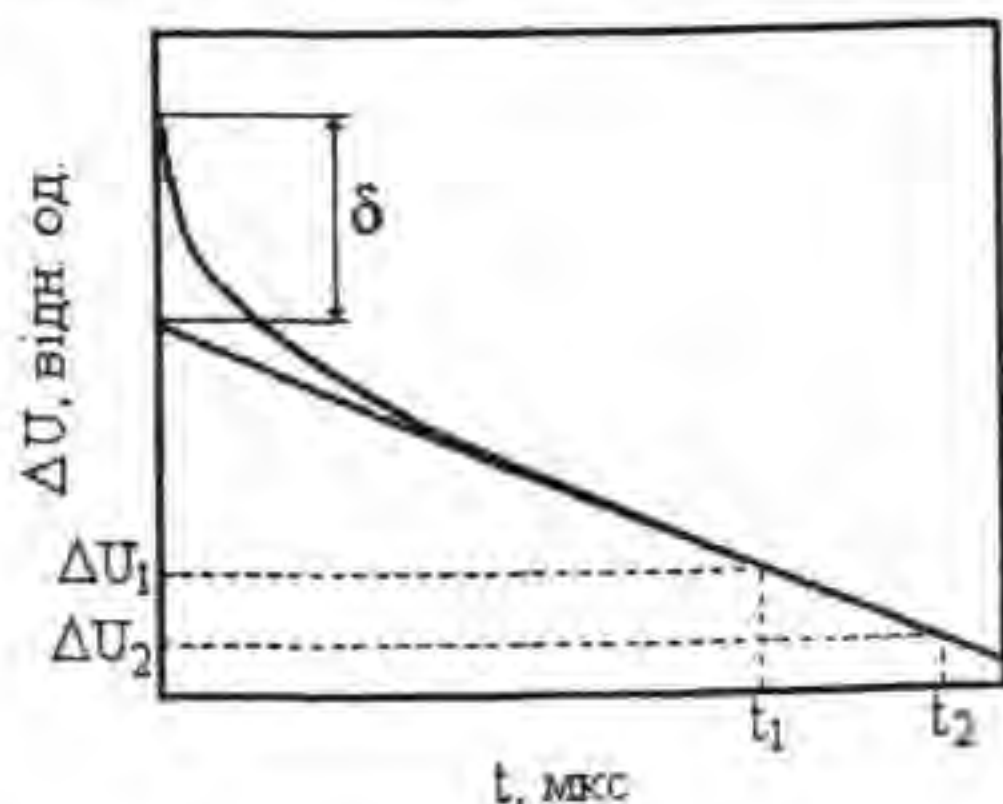


Рис.1 Розрахункова кінетика релаксації потужності відбитого від зразка сигналу $\Delta U(t)$, побудована у напівлогарифмічному масштабі.

Для визначення ефективного часу життя і швидкості поверхневої рекомбінації запропонованим методом не потрібно проводити

вимірювання в абсолютних величинах. Більш того, за відомими значеннями s і τ_{eff} за формулою (4) легко визначити об'ємний час життя носіїв заряду τ_v . Таким чином, з одного виміру визначаються зразу три важливих параметри носіїв заряду в пластині (s , τ_{eff} , τ_v).

Точність вимірювання швидкості поверхневої рекомбінації s за величиною відрізка δ крім похибки, яка виникає безпосередньо під час вимірювань (і визначається особливостями вимірюючої системи), залежить і від точності значення товщини зразка d і коефіцієнту дифузії D . Неточний вибір цих параметрів може впливати на точність отриманих результатів. Похибка при визначенні об'ємного часу життя τ_v більша за відповідну похибку визначення s і залежить від того, на скільки сильно відрізняються між собою величини τ_{eff} і $(a_1^2 D)^{-1}$.

Експериментальні результати

Досліджувались пластини р-Si різної товщини (200 мкм – 3 мм), що виготовлялись зі злитків вирощених методом Чохральського і безтигельної зонної плавки (виробник ВАТ „Квазар”, м.Київ). В роботі були використані методи вимірювання часової залежності релаксації потужності відбивання надвисокочастотного випромінювання (НВЧ-метод) [4] від пластини Si і, для порівняння, метод модуляції провідності у точковому контакті [1]. Для отримання високих значень s пластини полірувались алмазною пастою, а для отримання низьких s – порушений шар стравлювався у травнику типу CP-4 [3].

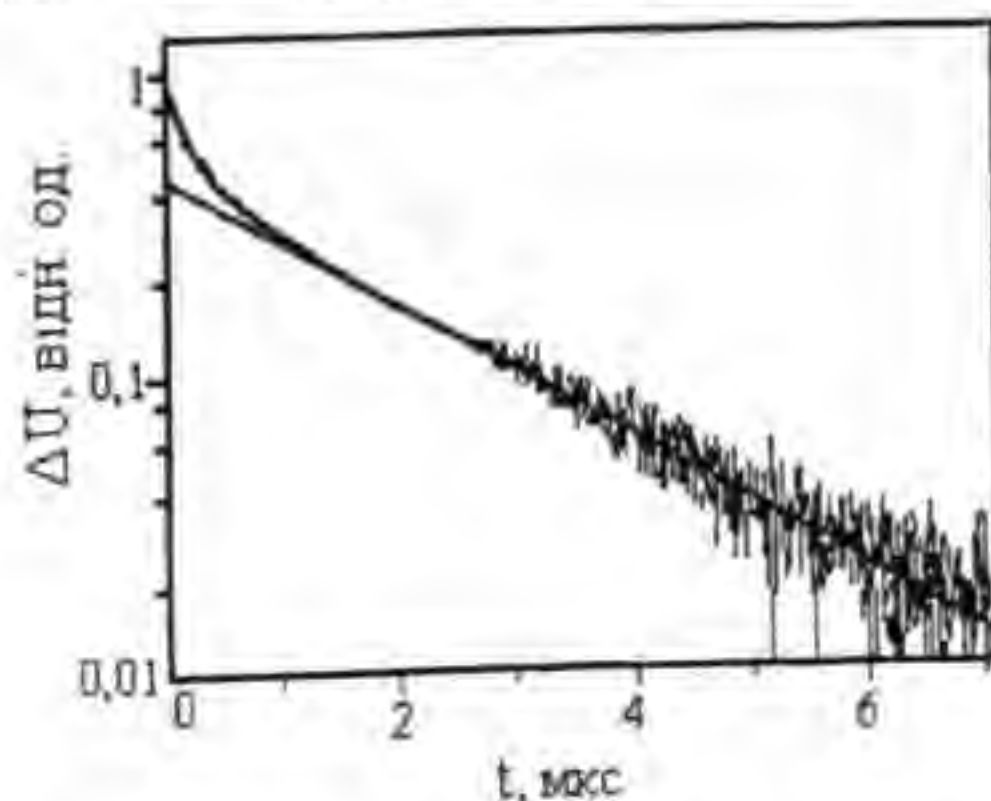


Рис.2 Кінетика релаксації $\Delta U(t)$, для зразка р-Si товщиною 200 мкм, побудована у напівлогарифмічному масштабі. Виміри проведені НВЧ-методом.

Для прикладу, на рис. 2 наведена експериментальна часова залежність величини сигналу $\Delta U(t)$, що вимірювалась за допомогою НВЧ релаксометра типу MWR-SIM, побудована в напівлогарифмічному масштабі для зразка p-Si ($d=200$ мкм). При математичному моделюванні коефіцієнт дифузії D був розрахований на основі роботи [11], коефіцієнти поглинання збуджуючого світла α - на основі [12], а коефіцієнти відбивання R - на основі [13].

На зразках виготовлених методом без тигельної зонної плавки розрахований за експериментальними даними «об'ємний» час життя складав сотні мкс, а на вирощених методом Чохральського - десятки мкс, що співпадало з паспортними даними злитків, з яких були виготовлені пластини. Виміряне значення швидкості поверхневої рекомбінації на полірованих поверхнях було більше ніж $\sim 10^4$ см/с, а після травлення у CP-4 [3] приблизно дорівнювало 1000 см/с. Спостерігалась задовільна кореляція результатів отриманих двома методами з літературними даними [3,6-10], що підтверджує працездатність запропонованого методу.

Разом з тим, слід підкреслити, що в області сильного поглинання світла кремнієм, виміряні кінетики релаксації потужності сигналу $\Delta U(t)$, можуть бути спотворені за рахунок залежності квантового виходу від довжини хвилі світла λ та інших нелінійних ефектів.

Висновки

Запропонований метод, дозволяє з одного виміру, визначати такі рекомбінаційні параметри напівпровідникових матеріалів: швидкість поверхневої рекомбінації, «ефективний» і «об'ємний» час життя носіїв заряду.

Отримані дані підтверджують працездатність запропонованого підходу по визначенню рекомбінаційних параметрів на технологічних пластинах Si. Простота методу дозволяє його використання в умовах виробництва для оптимізації технологічних процесів при виробництві сонячних елементів.

Список використаних джерел

1. Батавин В.В., Концевой Ю.А., Федорович Ю.В. Измерение параметров полупроводниковых материалов и структур. - М.: Радио и связь, 1985. - 264 с.

2. Зи С.М. Физика полупроводниковых приборов: - М.: Мир, 1973.- 656 с.
3. Файнштейн С.М. Обработка поверхности полупроводниковых приборов. - М.: Радио и связь, 1966. - 225 с.
4. Kunst M. Beck G. The study of charge carrier kinetics in semiconductors by microwave conductivity measurements. // J. Appl. Phys. - 1986. - 60. - P. 3558-3566.
5. Buczkowski A., Radzinski Z.J., Rozgonyi G.A., Shimura F. Separation of bulk and surface components of recombination life time obtained with a single laser/microwave photoconductance technique. // Journal of Appl. Phys. - 1992. - 72. - P. 2873-2877.
6. Maluytenko V., Chyrchik S. Surface recombination velocity in Si wafers by photoinduced thermal emission. // Appl. Phys. Lett. - 2006. - 89. - P. 051909-051915.
7. Baek D., Rouvimov S., Kim B., Jo T.-C., Schroder D.K. Surface recombination velocity of silicon wafers by photoluminescence. // Appl. Phys. Lett. - 2005. - 86. - P. 112110-112118.
8. Малютенко В.К., Чирчик С.В. Декларацийний патент на корисну модель №15589 Україна. Безконтактний спосіб визначення рекомбінаційних параметрів в напівпровідниках при підвищених температурах. // Промислова власність, - 2006. - № 7. - С. 4.
9. Чирчик С.В. Безконтактний спосіб вимірювання рекомбінаційних параметрів носіїв заряду в напівпровідниках. // Наукові вісті НТУУ «КПІ». - 2009. - № 6 - С.10-16
10. Jacoboni C., Canali C., Ottaviani G., Quaranta A.A. A Review of Some Charge Transport Properties of Silicon. // Solid State Electron. - 1977. - 20. - P. 77-85.
11. Rajkanan K., Singh R., Shewchun J. Absorption coefficient of silicon for solar cell. // Solid State Electron. - 1979. - 22, №9. - С.793-799.
12. Philipp H.R., Taft E.A. Optical Constant of Silicon in the Region 1 to 10 eV. // Physical Review. - 1960. - 120, №1. - P.37-38.

Надійшла до редколегії 14.09.10

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 532

Адаменко І.І., д.ф.-м.н., проф.,
Григор'єв А.М., к.ф.-м.н.,
Кузовков Ю.Г., к.ф.-м.н., ст.н.сп.

Вплив форми молекули на пружні властивості рідин. (Тверді гантелі, еліпсоїди обертання та сфероциліндри)

Методом Монте-Карло для модельних систем твердих гантелеподібних, сфероциліндричних та еліпсоїдальних частинок однакових за об'ємом, з різними факторами несферичності розраховані густина та ізотермічний модуль пружності в широкому інтервалі приведених тисків. Встановлено, що несферичність молекул визначає величину густини, але практично не впливає на баричну залежність модуля пружності.

Ключові слова: ізотермічний модуль пружності, несферичність молекули.

*E-mail: agrigoriev@univ.kiev.ua

У роботах [1, 2] нами досліджувався вплив форми молекули на теплофізичні властивості рідин на прикладі модельної системи двохатомних молекул, атоми яких взаємодіють з атомами інших молекул за допомогою потенціалу м'яких сфер з показником $m = 12$. Форма молекули варіювалася за допомогою зміни відстані між атомами та їхніх діаметрів. Ці параметри задавалися так, щоб об'єм двохатомної молекули не змінювався. Було встановлено, що форма молекули майже не впливає на баричну залежність модулів пружності. Виникає питання, наскільки загальним є цей результат? Чи є дана особливість характерною рисою двохатомних „м'яких” гантелей, чи вона є проявом більш універсальної закономірності? Крім того, починати дослідження впливу форми молекули доцільно для таких потенціальних моделей, в яких поняття об'єму та форми має строгий зміст, тобто для твердих частинок. Отже, метою даної роботи було з'ясування впливу форми молекули на теплофізичні властивості рідин на прикладі потенціальної моделі твердих частинок, різних за формою. А саме, твердих однакових за об'ємом гантелеподібних частинок, сфероциліндрів та еліпсоїдів обертання з різним ступенем несферичності.

Слід зазначити, що обрані нами системи твердих частинок досліджувалися в багатьох

I.I.Adamenko, professor
A.N.Grigoriev,
Yu.I.Kuzovkov

Molecular shape and elastic properties of liquids. (Hard dumbbells, spherocylinders and ellipsoids of revolution)

Number density and isothermal elasticity modulus of fluids of hard dumbbell, spherocylinder and ellipsoid of revolution particles of equal volumes with different non-sphericities were determined in Monte-Carlo simulations in a wide range of reduced pressures. It was shown that molecular nonsphericity determined density but did not affect the pressure dependence of isothermal elastic modulus.

Key words: isothermal elasticity modulus, molecular nonsphericity.

роботах, як теоретичними методами [3-11], так і методами комп'ютерного моделювання [12-24]. Так, в роботах Бублика і Нежбєди [25,26] на основі метода масштабної частинки було виведено рівняння стану твердих випуклих тіл (до яких відносяться, зокрема, тверді сфероциліндри та еліпсоїди). Це рівняння добре описує залежність фактору стисливості від термодинамічних параметрів. Проте, цінність рівняння стану визначається не лише здатністю правильно визначати залежність тиску або густини від відповідних термодинамічних параметрів, але й правильно описувати їхні похідні, такі як ізотермічний модуль пружності або коефіцієнт теплового розширення. В роботах з комп'ютерного моделювання по перевірці рівняння стану звичайно звертають увагу лише на залежність тиску від густини [12,13,17,27]. У зв'язку з цим виникає необхідність у дослідженні ефективності теоретичних рівнянь стану щодо опису термодинамічної залежності модуля пружності. (Перевіряти коефіцієнт теплового розширення немає потреби, оскільки в силу специфічності потенціальної моделі твердих частинок його можна визначити через тиск та модуль пружності).

Більшість робіт по дослідженню систем твердих несферичних частинок присвячена дослідженню фазових переходів ізотропна рідина – рідкий кристал та різних рідкокристалічних фаз

[12-24]. Існування рідкокристалічної фази спостерігається лише для систем досить видовжених частинок, в яких відношення довжини до ширини перевищує три [12]. Але така видовженість не характерна для молекул, що зберігають форму (маються на увазі такі, які можна вважати жорсткими, тобто без конфігураційних ступенів вільності), з яких складаються більшість рідин. Тому в даному дослідженні відношення довжини до ширини досліджуваних нами частинок не перевищувала двох.

На Рис. 1 наведені геометричні характеристики досліджуваних систем та розкрито зміст фактору несферичності α для кожної з них. Форма частинки змінювалася від сферичної ($\alpha=0$) до досить видовженої, яка характеризується фактором несферичності $\alpha = 1$. Об'єм частинки залишався сталим в усіх випадках (рівний об'єму сфери одиничного діаметру).

Методом Монте-Карло в ізотермічно-ізобаричному ансамблі [28] для систем із $N=108$ частинок були визначені густина та ізобаричний модуль пружності при приведеній температурі $T=1.0$ в інтервалі приведених тисків $P = 0.5 \div 8.0$.

При моделюванні використовувались три типи генерації нової конфігурації: зміщення молекули як цілого, поворот на випадковий кут навколо центра мас та зміна об'єму системи. Максимальне зміщення, максимальний кут повороту і максимальна зміна об'єму системи вибирались таким чином, щоб відповідна доля прийнятих конфігурацій дорівнювала 30 %. Нова конфігурація відкидалася, якщо частинки перекривалися. Для аналізу перекриття

сфероциліндрів використовувався алгоритм [29]. Перекриття еліпсоїдів встановлювалося за допомогою критерія В'єйра-Барона [30]. Гантелеподібні частинки вважалися такими, що перекриваються, якщо перекривалися відповідні сферичні атоми.

Згенерована послідовність конфігурацій системи використовувалась для знаходження середніх і середньоквадратичних флуктуацій об'єму системи. Густина та ізотермічний модуль пружності розраховувалися за формулами [28]:

$$\rho = \frac{N}{\langle V \rangle} \quad K_T = \frac{T \langle V \rangle}{\langle \Delta V^2 \rangle}$$

Кількість кроків для встановлення термодинамічної рівноваги дорівнювала 50 000, а кількість кроків для усереднення макроскопічних аналогів досліджуваних теплофізичних величин дорівнювала 1 000 000 при заданому P . Для оцінки похибки обчислюваних величин загальна послідовність конфігурацій розбивалася на 10 підпослідовностей, для кожної з яких обчислювалися середнє значення та дисперсія об'єму. Потім, аналогічно тому як це робиться в експериментальних вимірюваннях, знаходили середнє значення та випадкову похибку серії з 10 „вимірів”. Похибка визначення густини та ізотермічного модуля пружності складала відповідно 0.1% і 3%. Слід відмітити повільну збіжність дисперсії об'єму порівняно зі збіжністю середнього значення. Це вимагає набагато більшої кількості кроків (відповідно і часу) для її обчислення з розумною точністю [31].

На Рис. 2 – 4 зображено залежність густини від тиску для систем гантелеподібних частинок, сфероциліндрів і еліпсоїдів відповідно. Як видно з графіків, ця залежність є зростаючою і нелінійною. Подібна залежність характерна для більшості реальних рідин. Вплив форми частинки проявляється в тому, що при сталому тиску значення густини зменшується при переході від сферичних частинок до несферичних. Цей ефект більш помітний для системи гантелеподібних частинок і менш помітний – для еліпсоїдів.

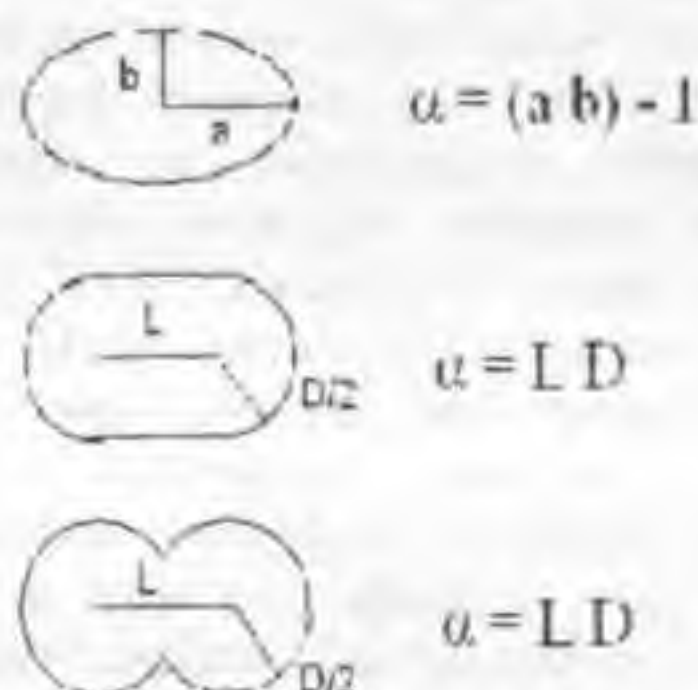


Рис. 1. Геометричні характеристики досліджуваних систем та зміст фактору несферичності α для кожної з них.

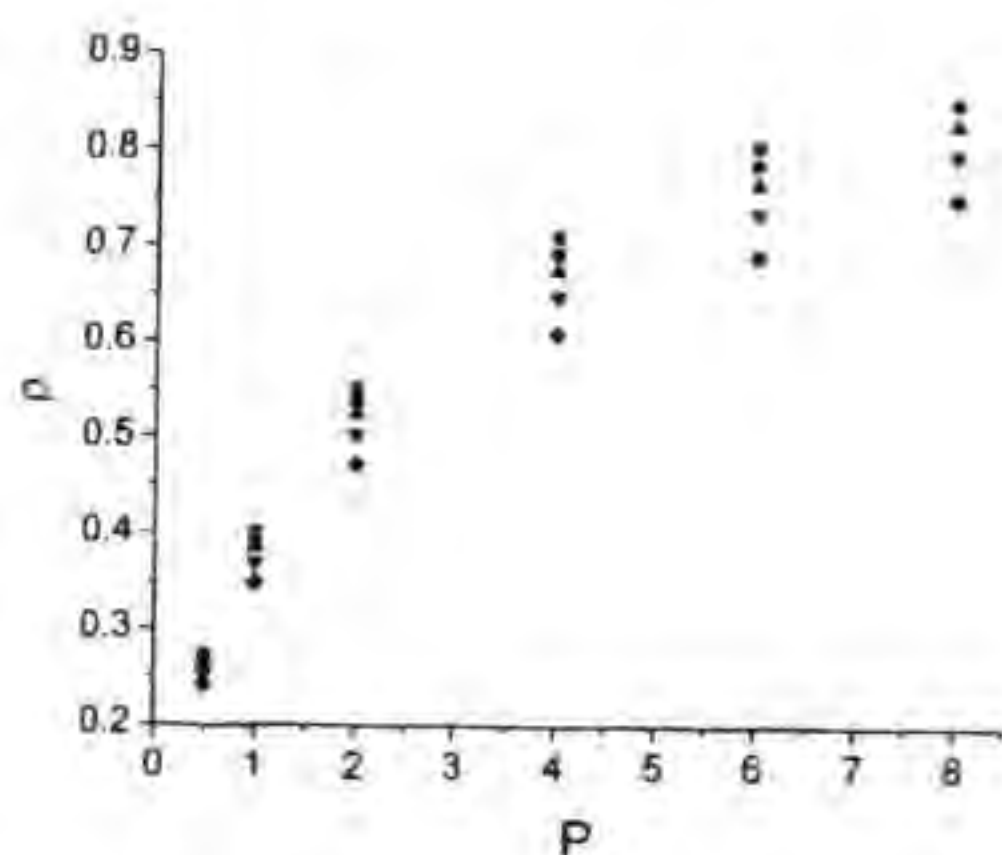


Рис. 2. Залежність густини від тиску для системи твердих гантелеподібних частинок ($\blacksquare - a=0.0$, $\bullet - a=0.25$, $\blacktriangle - a=0.5$, $\blacktriangledown - a=0.75$, $\blacklozenge - a=1.0$).

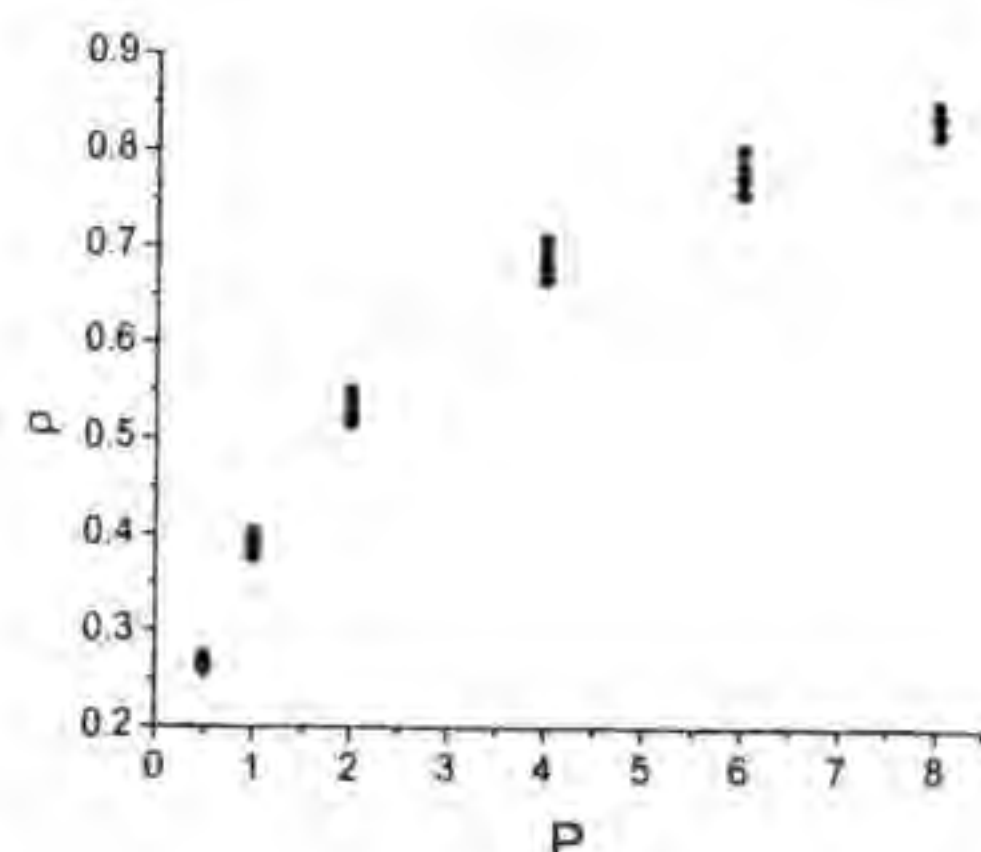


Рис. 4. Залежність густини від тиску для системи твердих еліпсоїдів обертання ($\blacksquare - a=0.0$, $\bullet - a=0.25$, $\blacktriangle - a=0.5$, $\blacktriangledown - a=0.75$, $\blacklozenge - a=1.0$).

На Рис. 4 – 6 зображено графіки залежності ізотермічного модуля пружності від густини. Ця залежність є зростаючою і нелінійною. Із збільшенням несферичності молекули модуль пружності збільшується для усіх типів досліджуваних систем. Але найбільш помітно цей ефект виражений для системи гантелеподібних частинок. Так, при густині $\rho=0.7$, модуль пружності збільшуються майже удвічі при переході від сферичних частинок ($a=0$) до несферичних ($a=1$). Слід відмітити „обернену” залежність від фактору несферичності порівняно зі системою „м’яких” гантелей [1], в якій значення модуля пружності зменшується при переході від сферичних до несферичних

частинок. Це означає, що крутизна потенціалу сил відштовхування суттєво впливає на залежність теплофізичних величин від форми молекули. Крім того, поняття „форма” у цьому випадку потребує детального аналізу. Це питання буде темою наших подальших досліджень.

На Рис. 2 і 3 показана також барична залежність густини відповідно до рівняння Бублика і Нежбеди для твердих випуклих тіл [32]:

$$\frac{P}{\rho k_B T} = \frac{1}{1-\eta} + \frac{rs}{\rho(1-\eta)^2} + \frac{qs^2 \left(1 - \frac{\eta}{3}\right)}{3\rho(1-\eta)^3},$$

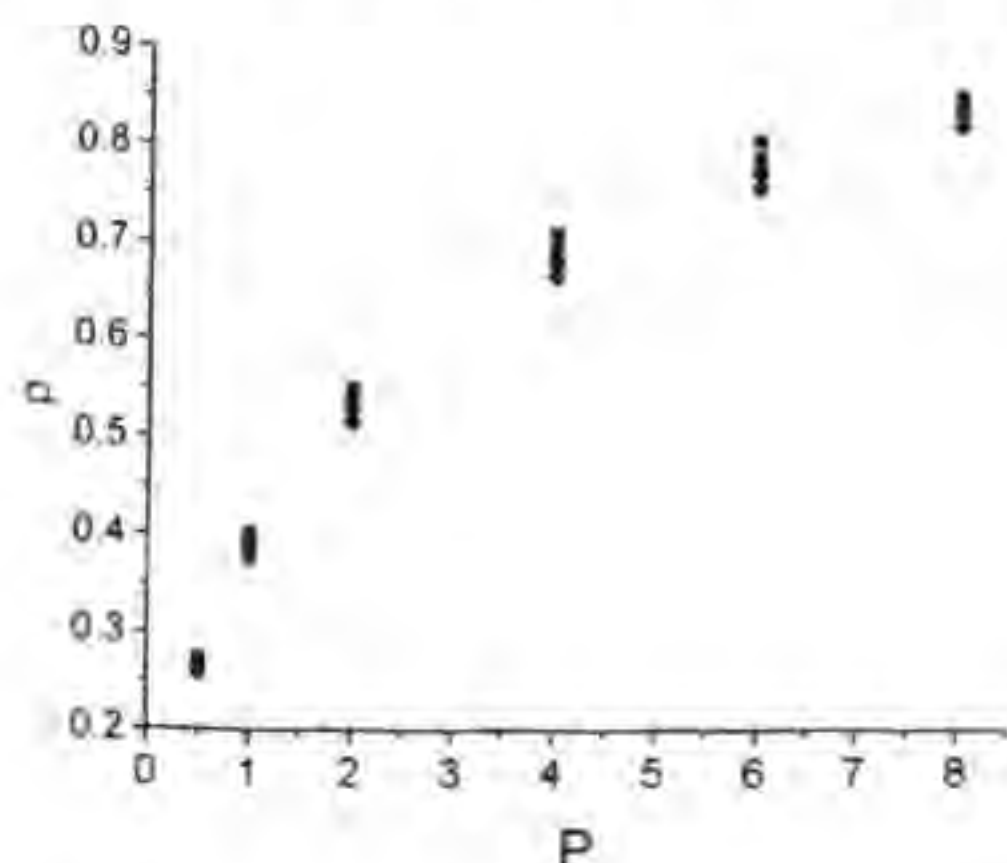


Рис. 3. Залежність густини від тиску для системи твердих сфероциліндрів ($\blacksquare - a=0.0$, $\bullet - a=0.25$, $\blacktriangle - a=0.5$, $\blacktriangledown - a=0.75$, $\blacklozenge - a=1.0$).

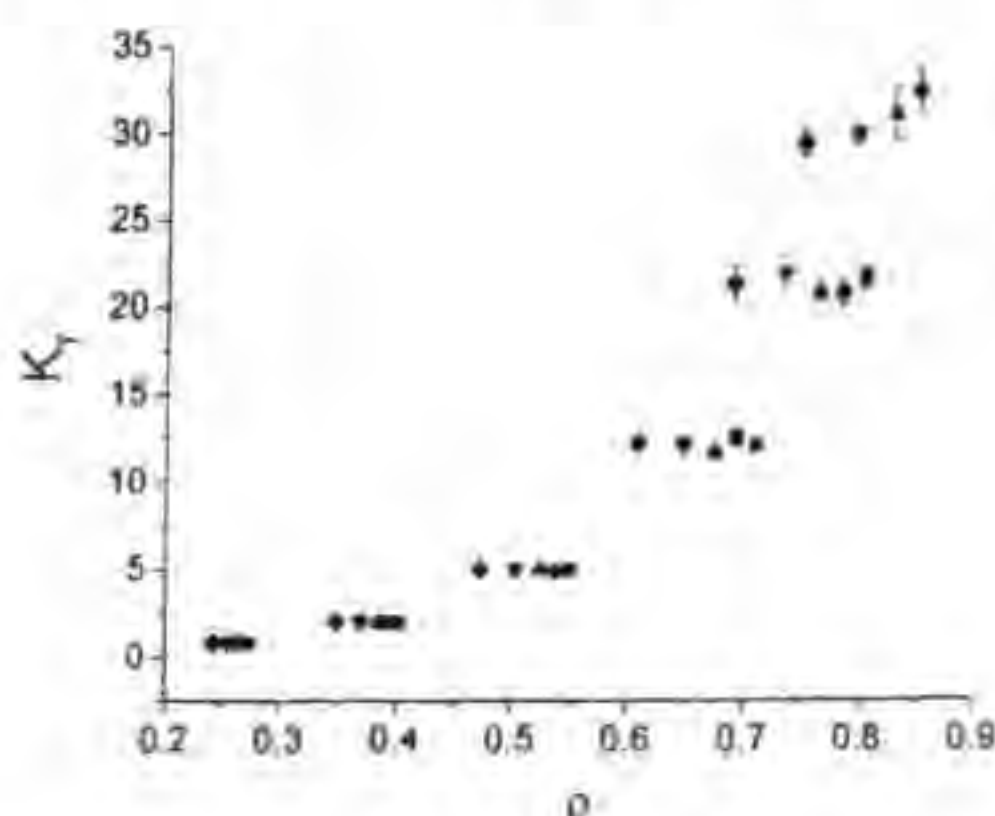


Рис. 5. Залежність ізотермічного модуля пружності від густини для системи твердих гантелеподібних частинок ($\blacksquare - a=0.0$, $\bullet - a=0.25$, $\blacktriangle - a=0.5$, $\blacktriangledown - a=0.75$, $\blacklozenge - a=1.0$).

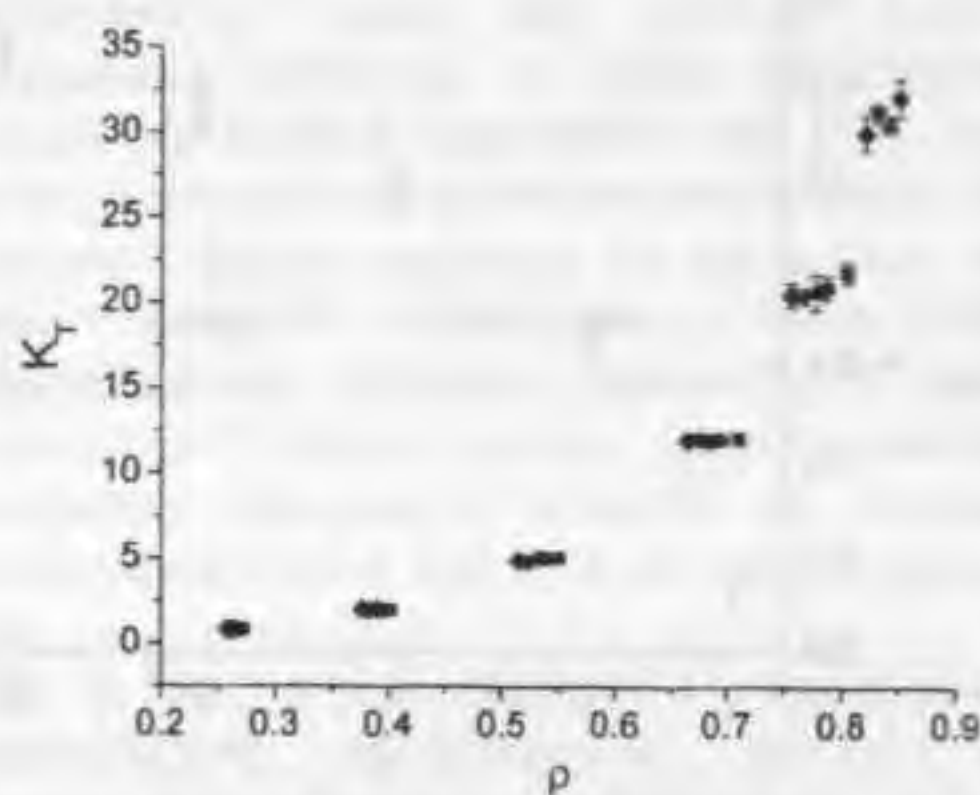


Рис. 6. Залежність ізотермічного модуля пружності від густини для системи твердих сфероциліндрів (■ – $a=0.0$, • – $a=0.25$, ▲ – $a=0.5$, ▼ – $a=0.75$, ◆ – $a=1.0$).

$$r = \rho R, \quad q = \rho R^2,$$

$$s = \rho S, \quad \eta = \rho V$$

де P – тиск, ρ – числова густина, k_B – стала Больцмана, R , S і V – середній радіус кривизни, площа поверхні та об'єм частинки.

Як видно, це рівняння стану добре описує баричну залежність густини, знайдену в комп'ютерному експерименті. Диференціюючи рівняння, можна знайти залежність модуля пружності від густини.

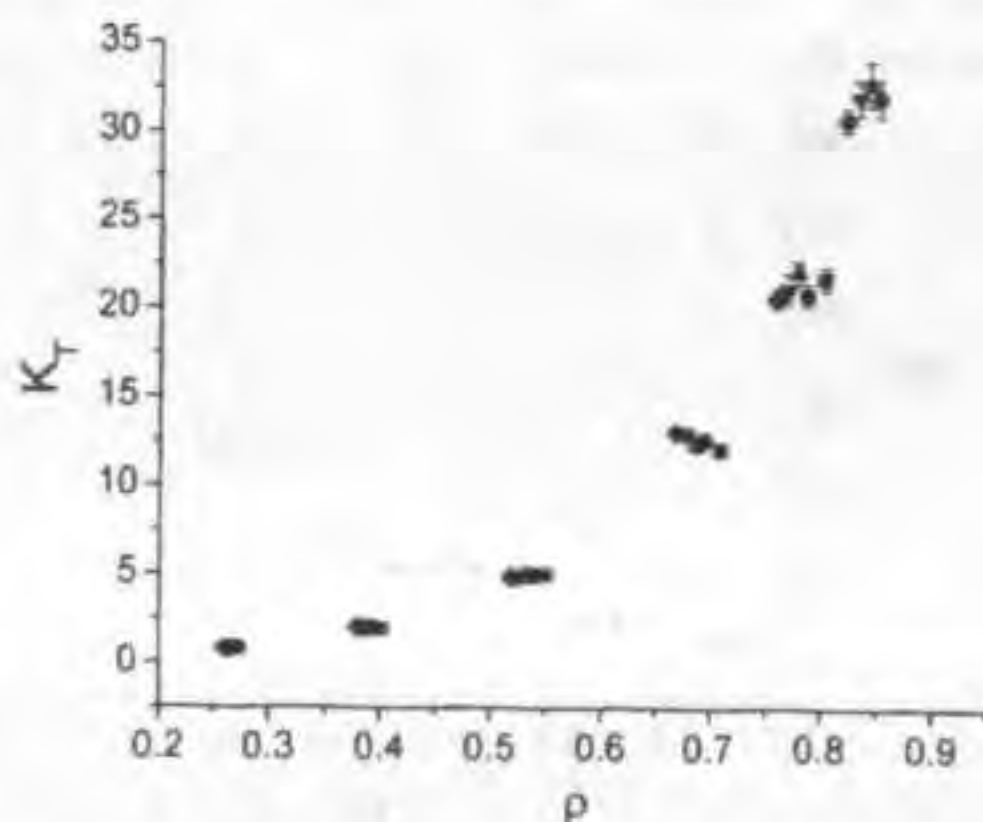


Рис. 7. Залежність ізотермічного модуля пружності від густини для системи твердих еліпсоїдів обертання (■ – $a=0.0$, • – $a=0.25$, ▲ – $a=0.5$, ▼ – $a=0.75$, ◆ – $a=1.0$).

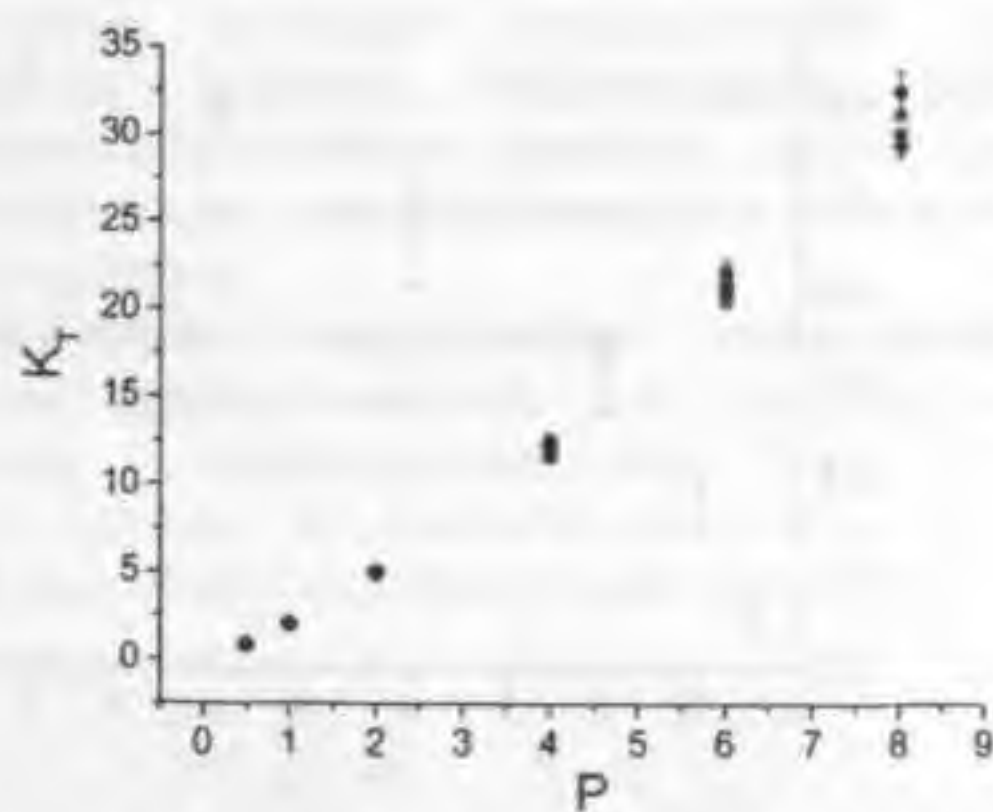


Рис. 8. Залежність ізотермічного модуля пружності від тиску для системи твердих гантелеподібних частинок (■ – $a=0.0$, • – $a=0.25$, ▲ – $a=0.5$, ▼ – $a=0.75$, ◆ – $a=1.0$).

На Рис. 5 і 6 показана також залежність модуля пружності від густини відповідно до рівняння Бублика і Нежбеди. Як видно, теоретична залежність добре описує залежність K_T від ρ . Це означає, що рівняння стану Бублика і Нежбеди правильно описує не тільки густина, але й її похідні по термодинамічним параметрам. Таким чином, рівняння стану БН з високою точністю описує усі пружні властивості системи твердих випуклих частинок, принаймні не дуже несферичних.

На Рис. 8 – 10 зображено баричні залежності модуля пружності досліджуваних систем. Залежність K_T є зростаючою і майже лінійною в

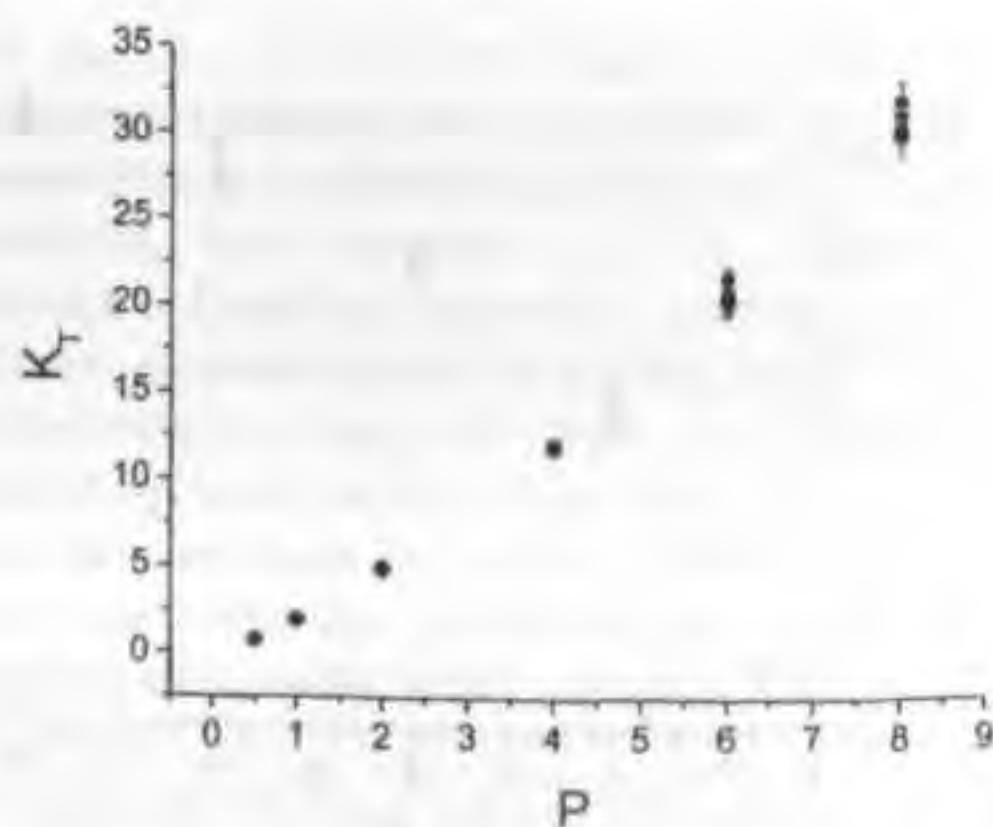


Рис. 9. Залежність ізотермічного модуля пружності від тиску для системи твердих сфероциліндрів (■ – $a=0.0$, • – $a=0.25$, ▲ – $a=0.5$, ▼ – $a=0.75$, ◆ – $a=1.0$).

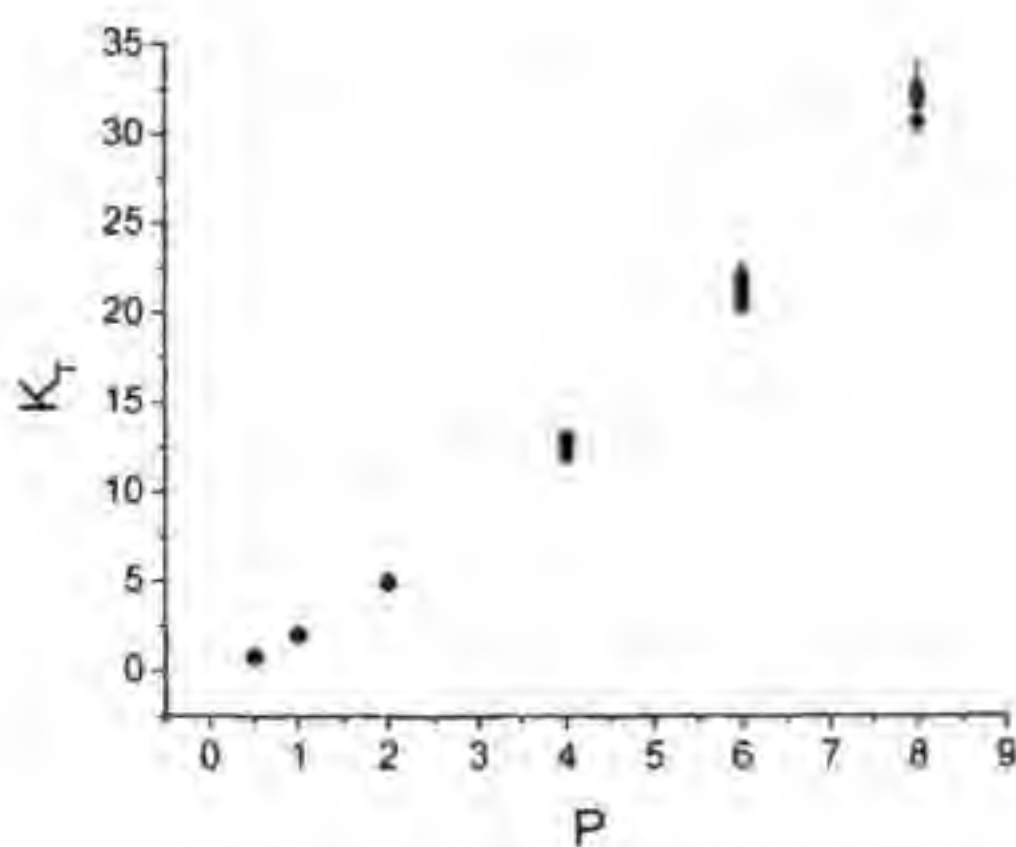


Рис. 10. Залежність ізотермічного модуля пружності від тиску для системи твердих еліпсоїдів обертання ($\blacksquare$ – $a=0.0$, $\bullet$ – $a=0.25$, $\blacktriangle$ – $a=0.5$, $\blacktriangledown$ – $a=0.75$, $\blacklozenge$ – $a=1.0$).

області високих тисків для усіх систем. Причому форма молекули не впливає на неї в межах похибки експерименту. Тобто барична залежність модуля пружності є однаковою для усіх систем твердих частинок. Це дає підставу думати, що така універсальність є проявом деякої більш загальної закономірності.

Отже, за умови однаковості власних об'ємів молекул баричні залежності пружних характеристик систем, взаємодія частинок яких має характер відштовхування, практично не залежать від форми молекули.

Список використаних джерел

1. Адаменко І.І., Григор'єв А.М., Кузовков Ю.Г., Мironenko О.К. Вплив форми молекули на теплофізичні властивості рідин. I. Пружні характеристики // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2009. – № 3. – С.
2. Адаменко І.І., Григор'єв А.М., Кузовков Ю.Г., Мironenko О.К. Вплив форми молекули на теплофізичні властивості рідин. I. Теплові характеристики // Вісник Київського

університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2009. – № 4. – С.

3. Юхновский И.Р., Головкин М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. – К.: Наукова думка, 1980. – 372 с.
4. Barker J.A., Henderson D. What is "liquid"? Understanding the states of matter // Rev. Mod. Phys. – 1976. – Vol. 48. – P. 587 – 671.
5. Rosenfeld Y. Scaled field particle theory of the structure and the thermodynamics of isotropic hard particle fluids // J. Chem. Phys. – 1988. – Vol. 89. – P. 4272 – 4287.
6. Hansen-Goos H., Mecke K. Fundamental measure theory for inhomogeneous fluids of non-spherical hard particles // Phys. Rev. Lett. – 2009. – Vol. 102. – 018302.
7. Song Y., Mason E.A. Equation of state for a fluid of hard convex body in any number of dimensions // Phys. Rev. A. – 1990. – Vol. 41. – P. 3121 – 3124.
8. Wertheim M.S. Fluids of hard diatomic molecules. I // J. Chem. Phys. – 1983. – Vol. 78. – P. 4619 – 4624.
9. Wertheim M.S. Fluids of hard diatomic molecules. II // J. Chem. Phys. – 1983. – Vol. 78. – P. 4625 – 4631.
10. Cheung D.L., Anton L., Allen M.P., Masters A.J. Structure of molecular liquids: Cavity and bridge functions of the hard spheroid fluid // Phys. Rev. E. – 2006. – Vol. 73. – 061204
11. Perera A. Fluids of hard natural and Gaussian ellipsoids: A comparative study by integral equation theories // J. Chem. Phys. – 2008. – Vol. 129. – 194504.
12. Allen M.P., Evans G.T., Frenkel D., Mulder B.M. Hard convex body fluids // Adv. Chem. Phys. – 1993. – Vol. 86. – P. 1 – 166.

13. *De Souza E.S., Canuto S.* Equation of state of hard spherocylinder fluid mixtures // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2002. – Vol. 41. – P. 3121 – 3124.
14. *Frenkel D., Mulder B.M., McTague J.P.* Phase diagram of a system of hard ellipsoids // *Phys. Rev. Lett.* – 1984. – Vol. 52. – P. 287 – 290.
15. *Talbot J., Kivelson D., Allen M.P., Evans G.T., Frenkel D.* Structure of the hard ellipsoid fluid // *J. Chem. Phys.* – 1990. – Vol. 92. – P. 3048 – 3057.
16. *Veerman J.A.C., Frenkel D.* Phase diagram of a system of hard spherocylinders by computer simulation // *Phys. Rev. A.* – 1990. – Vol. 41. – P. 3237 – 3244.
17. *McGrother S.C., Williamson D.C., Jackson G.* A re-examination of the phase diagram of hard spherocylinders // *J. Chem. Phys.* – 1996. – Vol. 104. – P. 6755 – 6771.
18. *Frenkel D.* The simulation of entropic phase transitions // *J. Phys.: Cond. Matter.* – 1994. – Vol. 6. – P. A71 – A78.
19. *Galindo A., Haslam A.J., Varga S., Jackson G., Vanakaras A.G., Photinos D.J., Dummur D.A.* The phase behavior of a binary mixture of rodlike and disklike mesogens: Monte-Carlo simulation, theory and experiment // *J. Chem. Phys.* – 2003. – Vol. 119. – P. 5216 – 5225.
20. *Vega C., Monson P.A.* Plastic crystal phases of hard dumbbells and hard spherocylinders // *J. Chem. Phys.* – 1997. – Vol. 107. – P. 2696 – 2697.
21. *Vega C., Paras E.P.A., Monson P.A.* Solid-fluid equilibria for hard dumbbells via Monte-Carlo simulation // *J. Chem. Phys.* – 1992. – Vol. 96. – P. 9060 – 9072.
22. *Frenkel D., Bolhuis P.* Tracing the phase boundaries of hard spherocylinders // *J. Chem. Phys.* – 1997. – Vol. 106. – P. 666 – 687.
23. *Letz M., Schilling R., Latz A.* Ideal glass transitions for hard ellipsoids // *Phys. Rev. E.* – 2000. – Vol. 62. – P. 5173 – 5178.
24. *Batten R.D., Stillinger F.H., Torquato S.* Phase behavior of colloidal superballs: Shape interpolation from spheres to cubes // *Phys. Rev. E.* – 2010. – Vol. 81. – 061105.
25. *Boublik T., Nezbeda I.* // *Collect. Czech. Chem. Commun.* – 1986. – Vol. 51. – P. 2301.
26. *Boublik T.* // *Mol. Phys.* – 1981. – Vol. 42. – P. 209.
27. *Song Y., Mason E.A.* Analytical equation of state for molecular fluids: Comparison with experimental data // *Phys. Rev. A.* – 1990. – Vol. 42. – P. 4749 – 4755.
28. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer simulation of liquids. – Oxford, Clarendon Press, 1986. – 385 p.
29. *Vega C., Lago S.* A fast algorithm to evaluate the shortest distance between rods // *Computers and Chemistry.* – 1994. – Vol. 18. – P. 55 – 59.
30. *Vieillard-Baron J.* Phase transitions of the classical hard ellipse systems // *J. Chem. Phys.* – 1972. – Vol. 56. – P. 4729 – 4744.
31. *Pronk S., Frenkel D.* Large difference in the elastic properties of fcc and hcp hard sphere crystals // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – Vol. 90. – 255501.
32. *Смирнова Н.А.* Молекулярные теории растворов. – Л.: Химия, 1987. – 336 с.

Надійшла до редколегії 19.04.10

УДК: 536.7:544.1; 577

Адаменко І.І., д.ф.-м.н., проф.,

Королович В.Ф., асп.,

Архипов С.О., студ.

Мороз К.О., ас., к.ф.-м.н.

Молекулярна структура води у вуглецевих нанотрубках

Огляд молекулярної структури води у вуглецевих нанотрубках базується на дослідженнях проведених методом молекулярної динаміки і даний в термінах радіального розподілу атомів, динаміки водневих зв'язків та калоричних властивостей системи.

Ключові слова: вода у вуглецевих нанотрубках, метод молекулярної динаміки, водневі зв'язки

*E-mail: korolovich@gmail.com

Вступ

Властивості рідин у пористих матеріалах (аерогелі, силікагелі, вуглецеві нанотруби, пористе скло та ін.) можуть значно відрізнятися від аналогічних властивостей в об'ємній фазі. Яскравий приклад – експериментальне дослідження зсуву фазової діаграми рідина-пара [1], коефіцієнту самодифузії молекул води від розмірів пори [2] академіком НАН України Л.А. Булавіним. В цих роботах показано, що суттєві зміни властивостей рідини в обмежених об'ємах зумовлені як обмеженістю простору матеріалом, що формує пори так і взаємодією між стінками пор і молекулами рідини.

Дослідженню молекулярної структури і фізичних властивостей води у вуглецевих нанотрубках присвячено багато робіт [3-15], що зумовлено не лише можливістю цікавого практичного застосування [16, 17], а й значного кроку в розумінні функціонування подібних явищ в природі: біологічні канали [18] ітд..

Спільною рисою вказаних вище робіт є застосування чисельних методів, що пов'язано з складністю проведення експерименту. Наприклад для дослідження молекулярної структури води у CNT методами, що базуються на аналізі кутового розподілу розсіювання нейтронів необхідно зорієнтувати окремі CNT в кластерах паралельно одна – одній. На даний момент це актуальна задача.

I.I. Adamenko, Dr. Sci., Prof.

V. F. Korolovych*, PhD,

S. O. Arkhipov, stud.,

K.O. Moroz, PhD.

Molecular structure water in carbon nanotubes

It is reviewed the investigations of molecular structure of water inside nanotubes by using the molecular dynamics simulations. The results are presented in terms of radial distribution function, h-bonds dynamics and caloric properties of system.

Key Words: water system in carbon nanotubes, molecular dynamics simulation, hydrogen bonds

Чисельні методи в розглядуваних роботах [3, 6, 7] представлені методом молекулярної динаміки, що базується на застосуванні потенціальних моделей, адекватність яких визначає ступінь адекватності всіх структурних і фізичних висновків про досліджувану систему. Тому коротко оглянемо умови і моделі згідно яких досліджувалася молекулярна структура та фізичні властивості води у вуглецевих нанотрубках.

Вода описувалася SPC потенціальною моделлю в роботі [3], її модифікацією SPC/E [5, 19, 20] в роботі [7] та трьох точковою TIP3P потенціальною моделлю води (transferable intermolecular potential with three points [21]) в роботі [6]. Зазначимо, що TIP3P була розвинена в чотирьох точкову TIP4P потенціальну модель, шляхом введення нового віртуального центру на бісектрисі кута НОН в напрямку атомів водню з зміщенням від'ємного заряду кисню в цей центр [22].

В роботі [3] модель одностінної CNT хіральністю (6,6) (відповідає діаметру 0,81 нм) має довжину 18,42 нм та різну кількість молекул H_2O в середині, що зумовлено дослідженням впливу густини молекул води на динаміку Н – зв'язків між ними.

Цікавість дослідження поведінки води у одностінних вуглецевих нанотрубках хіральністю саме (6,6) зумовлена:

1) найменшим діаметром CNT в яку можуть проникнути молекули H_2O [4].

Спів розмірністю молекули води з геометричними параметрами CNT, що зумовлює підвищену чутливість фізичних величин до діаметру молекул, їх форми, кількості.

- 2) найбільшим часом життя водневих зв'язків між молекулами води у порівнянні з CNT іншого діаметру [5] та вільною водою.

Слід зазначити, що в статті [3] приділяється увага терміну «густина» молекул води в CNT. Це зумовлено: 1) відсутністю точного значення внутрішнього об'єму CNT (неможливість визначення точного положення поверхні атомів вуглецю C [23]) та 2) малою кількістю молекул води. Адже термін «густина» звичайно використовується для рідин. Отже під «густиною» η автори статті розуміють кількість молекул на одиницю довжини CNT. Одиниця вимірювання η [нм⁻¹].

В [3] на одиницю довжини CNT припадає від 50 до 81 молекул H₂O, що

відповідає густині вільної води від $157 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ до $254 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ (розрахунки базуються на визначенні

діаметра прийнятого в роботі [5]). Або від 2,71 нм⁻¹ до 4,40 нм⁻¹ в одиницях густини η (в (6,6) CNT молекули H₂O утворюють одномірний ланцюг вздовж осі нанотруби).

В роботі [6] моделювання було виконане в пакеті програм GROMACS (сукупність програм та бібліотек для виконання молекулярного моделювання, мінімізації енергії і подальшого аналізу отриманих даних траєкторії. Використовується для прогнозу макроскопічних фізичних властивостей, заснованих на детальному знанні моделі розглядуваної системи і аналізу схожості відомих структурних та хімічних даних [24]) при постійному тиску $P = 1 \cdot 10^5$ Па та температурі 300 К з початковими розмірами комірки:

$$L_x = L_y = L_z = 4.0 \text{ нм}$$

Моделювання 80 молекул води внесених у одностінну CNT хіральністю (10,10) (відповідає діаметру 1,35 нм) за різних температур: 233К, 309К, 344К проводилося в роботі [7]. Отримані данні порівнювалися з відповідними даними для вільної води (отримані в цій же роботі) при 233К та 309К. Оскільки при 344К у вільній воді починається процес випаровування.

Аналіз проведених досліджень показав, що при введенні CNT в воду молекули води можуть спонтанно проникати в неї [4], а всередині CNT відповідно діаметру: 1,62; 1,35; 1,08 та 0,81 нм (або в індексах хіральності (12,12); (10,10); (8,8) та (6,6)) утворювати різні молекулярні структури [4, 25, 26]: подвійні циліндричні шари, молекулярні ланцюжки в циліндричному шарі (molecular chain in a cylindrical water layer), одномірні ланцюжки.

Детальне уявлення про молекулярну структуру води і її фізичні властивості у вуглецевих нанотрубках можна отримати з аналізу:

а) Профілів радіального розподілу атомів кисню О і водню Н

Найбільш інформативною і найбільш вживаною характеристикою ближнього порядку у рідинах є бінарна кореляційна функція розподілу атомів $g(r)$:

$$g(r) = \frac{\nu}{4\pi r^2} \left(\frac{d\bar{Z}}{dr} \right)_r \text{ де } \bar{Z}|_r = \frac{1}{p} \sum_{n=1}^p \frac{1}{l} \sum_{\mu=1}^l Z_{\mu}^n(r),$$

$\bar{Z}$ - середня кількість сусідів, що розташовані на відстанях $r, r + dr$ від базисної частинки, l - повна кількість частинок у комірку, а p - повна кількість часових інтервалів.

Зазначимо, для дослідження кореляцій на більших відстанях більш зручною є різницева радіальна функція розподілу атомів, в якій чітко

проявляються кореляції при $r \geq 6,5 \text{ \AA}$:

$$G(r) = r^2 [g(r) - 1],$$

де $g(r)$ - парна кореляційна функція розподілу атомів.

Дослідженню радіальних функцій розподілу атомів кисню $g_{O-O}(r)$, водню $g_{H-H}(r)$ та кисню відносно водню $g_{O-H}(r)$ води в одностінній вуглецевій нанотрубі присвячена стаття [7]. На Рис.1. представлено порівняння $g_{O-O}(r)$, $g_{H-H}(r)$, $g_{O-H}(r)$ води у CNT з аналогічними радіальними функціями розподілу атомів вільної води при 2-ох температурах: 233К та 309К.

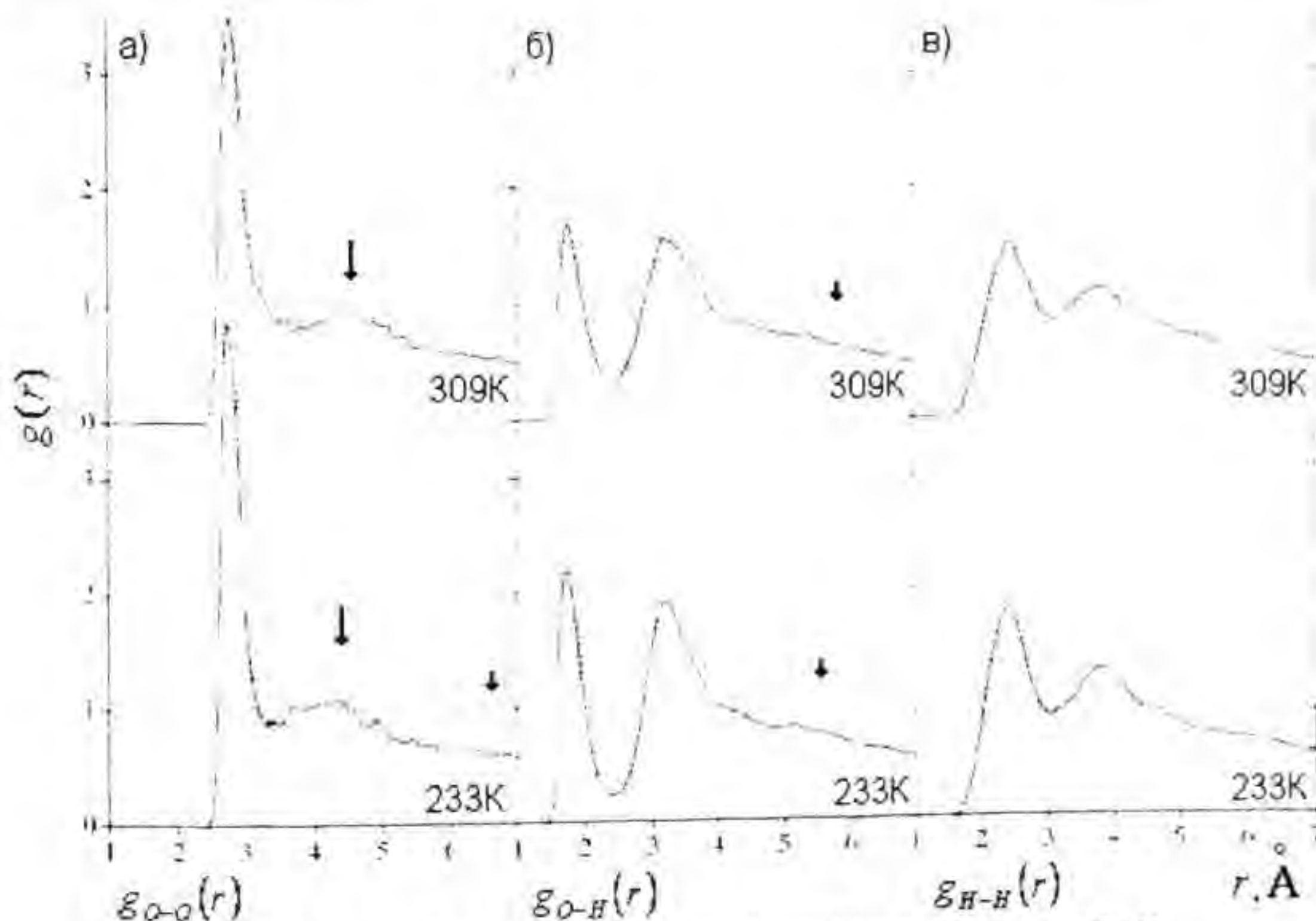


Рис.1. Порівняння бінарних корелятивних функцій розподілу атомів O і H вільної води (штрихована лінія) і води у CNT (суцільна лінія – більш темна) при температурах 233K та 309K^[7]

На кривих $g_{O-O}(r)$ вільної води і води у CNT (Рис.1.а.) спостерігається 2 – а максимуми при 2,8 Å та 4,5 Å [7]. Перший максимум при 2,8 Å відповідає довжині водневого зв'язку у льоді I. Другий максимум при 4,5 Å відповідає відстані між атомами O безпосередньо не зв'язаними водневим зв'язком. В вільній воді спостерігаються більш чіткі максимуми при 2,8 Å та 4,5 Å, що пояснюється більшою кількістю однотипних «сусідів» у розглядуваного атома. Вплив температури на $g_{O-O}(r)$ значніше проявляється у вільній воді, так висота максимуму при 2,8 Å функції $g_{O-O}(r)$ вільної води зменшується приблизно на 29%, а для води у CNT приблизно на 18%. Такі зміни на кривих $g_{O-O}(r)$ пояснюються зменшенням кількості найближчих сусідів у молекули води при зростанні температури (супроводжуються зменшенням густини води) та «екрануванням» впливу температури на воду вуглецевою нанотрубою.

Слід зазначити, що на Рис.1.а.

проявляються кореляції і в області 6,7 Å, однак функція $g_{O-O}(r)$ швидко затухає з відстанню (тому автори статті обмежилися описанням ближнього порядку).

На кривих $g_{O-H}(r)$ вільної води і води у CNT спостерігається два чітких максимуми [7] (Рис.1.б.) при 1,78 Å і в околі 3,20 Å.

Максимум при 1,78 Å відповідає рівноважній відстані водневого зв'язку між двома молекулами води з енергією розриву 5,5 ккал/моль, що на порядок менше енергії ковалентного зв'язку і на порядок більше енергії дисперсійної взаємодії [27].

Другий максимум кривих $g_{O-H}(r)$ (Рис.1.б) спостерігається для вільної води при 3,24 Å, а для води у CNT при 3,23 Å. Відмінність в положенні цього максимуму у вільній воді і воді у CNT пов'язана з «екрануючим» ефектом CNT.

Оскільки водневі зв'язки визначають положення молекул води то логічно, що функція

$g_{O-H}(r)$ чутливіша до зміни температури за функцію $g_{O-O}(r)$. Зростання температури від 233K до 309K викликає зменшення висоти максимума $g_{O-H}(r)$ вільної води приблизно на 39%, а води у CNT приблизно на 25%. Таку різницю в зміні висоти максимумів можна пояснити «екрануючим» ефектом вуглецевої нанотруби.

На кривій $g_{O-H}(r)$ вільної води спостерігається незначні кореляції в інтервалі від 5 Å до 6 Å.

На Рис.1.в. представлено результати дослідження функції $g_{H-H}(r)$ вільної води і води у CNT. В околі 2,43 Å і в околі 3,83 Å спостерігається два чітких максимуми на кривих $g_{H-H}(r)$ [7]. Ці максимуми пов'язані з першою та другою координаційними сферами, тобто максимум в околі 2,43 Å відповідає найближчій відстані між атомами одного типу, а максимум в околі 3,83 Å слідує найближчій відстані (більша від радіуса 1-ї координаційної сфери) між атомами одного типу. На цих кривих прослідковуються всі закономірності, що і на $g_{O-O}(r)$, $g_{O-H}(r)$.

Отримані результати досліджень узгоджуються з результатами роботи [6]. В якій досліджено розподіл молекул води в CNT та колективну орієнтацію дипольного моменту води [6], враховуючи $H_2O - H_2O$ і $H_2O - CNT$ взаємодії. Стаття [6] є продовженням роботи [28], де при моделюванні фізичних властивостей води

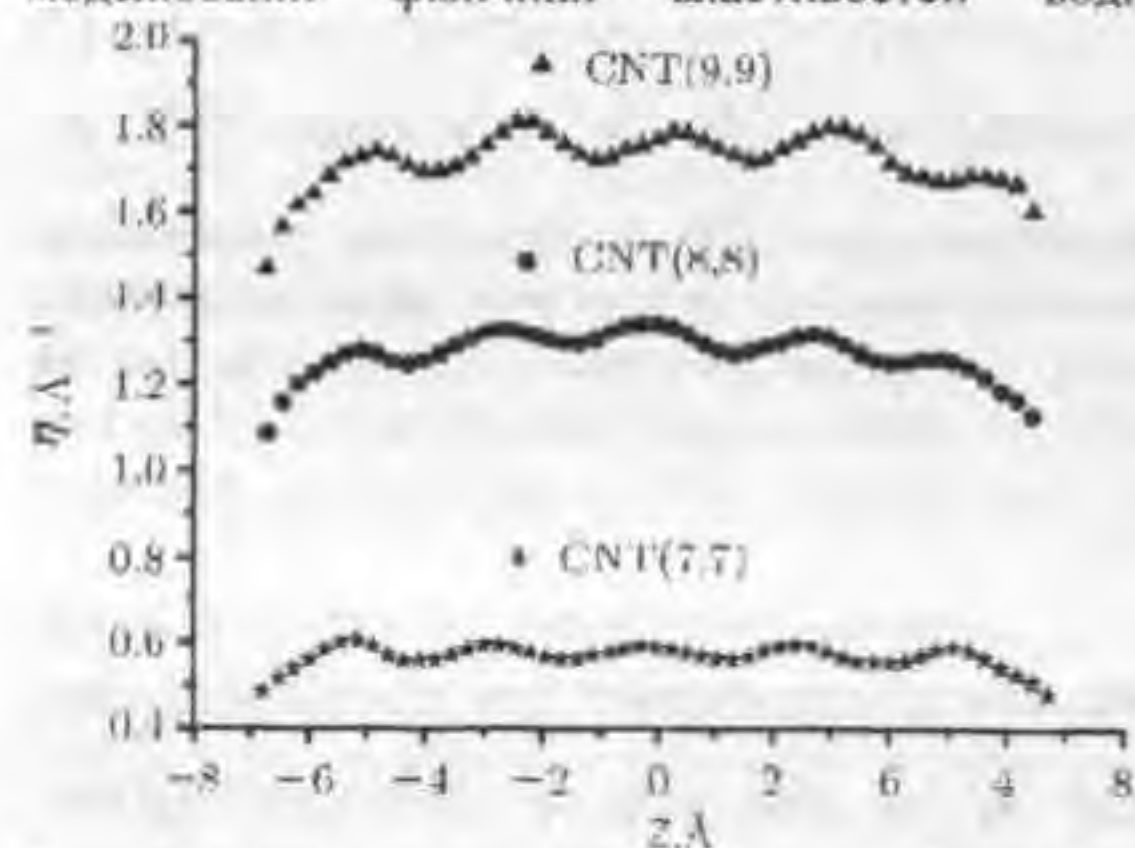


Рис.2. Розподіл молекул води (η) вздовж осі Z CNT різної хіральності: (7,7), (8,8), (9,9) [6]

в одностінних CNT діаметром 8,1 Å та довжиною 13,1 Å під деформацією було виявлено чітку хвилеподібну молекулярну структуру води в CNT (що, корелює з дослідженнями поведінки рідин в біологічних каналах [29]).

В цій роботі [6] було отримано розподіл молекул води вздовж осі CNT. Для CNT хіральністю (6,6) спостерігається (Рис.2.) в середині 5 молекул води утворюючих одномірний ланцюжок (крива відсутня на графіку), для CNT (7,7); CNT (8,8) та (9,9) спостерігається відповідно 7,7 ; 17,0 та 23,1 молекул H_2O . Як бачимо з зростанням радіусу вуглецевої нанотруби зростає кількість молекул води в середині CNT та проявляється хвилеподібна молекулярна структура води в середині CNT. Подібний розподіл молекул води спостерігається і в GlpF каналах [29].

Транспорт молекул води через CNT є колективним явищем, оскільки рух однієї молекули H_2O потребує руху усього ланцюжка молекул води.

б) Стабільність води в вуглецевих нанотрубках

Стабільність води в вуглецевих нанотрубках аналізувалася по даним динаміки водневих зв'язків, що в [3] описується двома кореляційними функціями $C_{HH}(t)$ і $N_{HH}(t)$:

$$-\frac{C_{HH}(t)}{dt} = kC_{HH}(t) - kN_{HH}(t)$$

$C_{HH}(t)$ - пульсуюча («intermittent» в [3]) кореляційна функція води, яка визначається кількістю збережених за час t водневих зв'язків серед певної початкової кількості. Вона включає також і водневі зв'язки, що руйнуються але знову утворюються за інтервал часу t ; $N_{HH}(t)$ представляє внесок молекулярних пар, що залишилися біля кожної іншої пари молекул за час руйнування водневого зв'язку [5]. Час життя водневого зв'язку в вказаній вище формулі визначається величиною $\frac{1}{k}$;

Критерієм утворення водневого зв'язку між двома молекулами H_2O в [3] є геометричний критерій [5, 30, 31, 32].

З зменшенням діаметру CNT пульсуюча кореляційна функція $C_{HH}(t)$ водневих зв'язків між молекулами H_2O всередині CNT, що характеризує час життя водневих зв'язків проявляє більшу стабільність величини $C_{HH}(t)$ в

порівнянні з вільною водою [5]. А в (6,6) CNT час життя водневих зв'язків в 1,5 раза більший

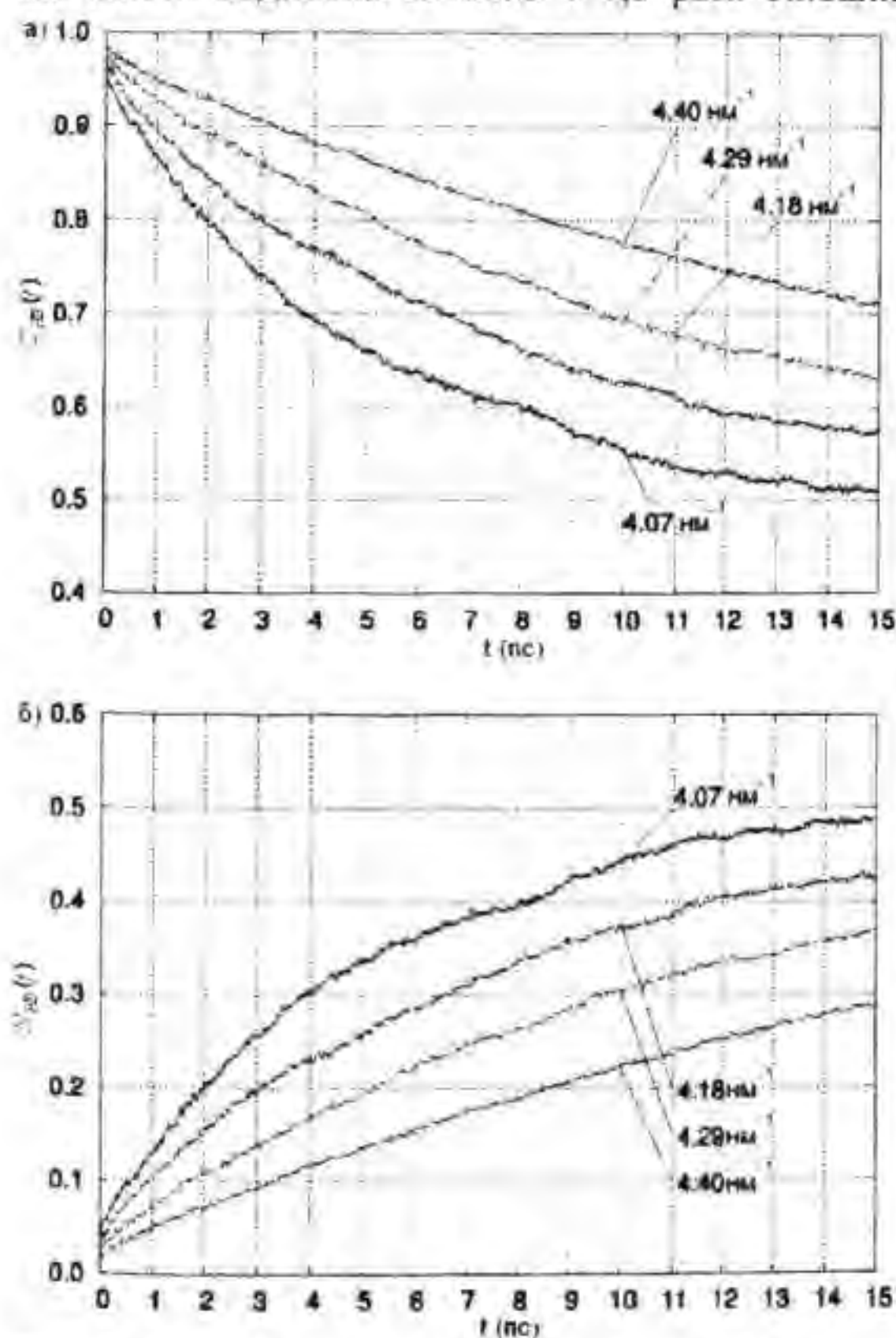


Рис.3. Залежність кореляційних функцій C_{HB} і N_{HB} води від часу t , для різних значень η [нм⁻³] ніж в CNT іншого діаметру [5]. Цей факт пов'язаний з поєднанням обмеженості рухливості

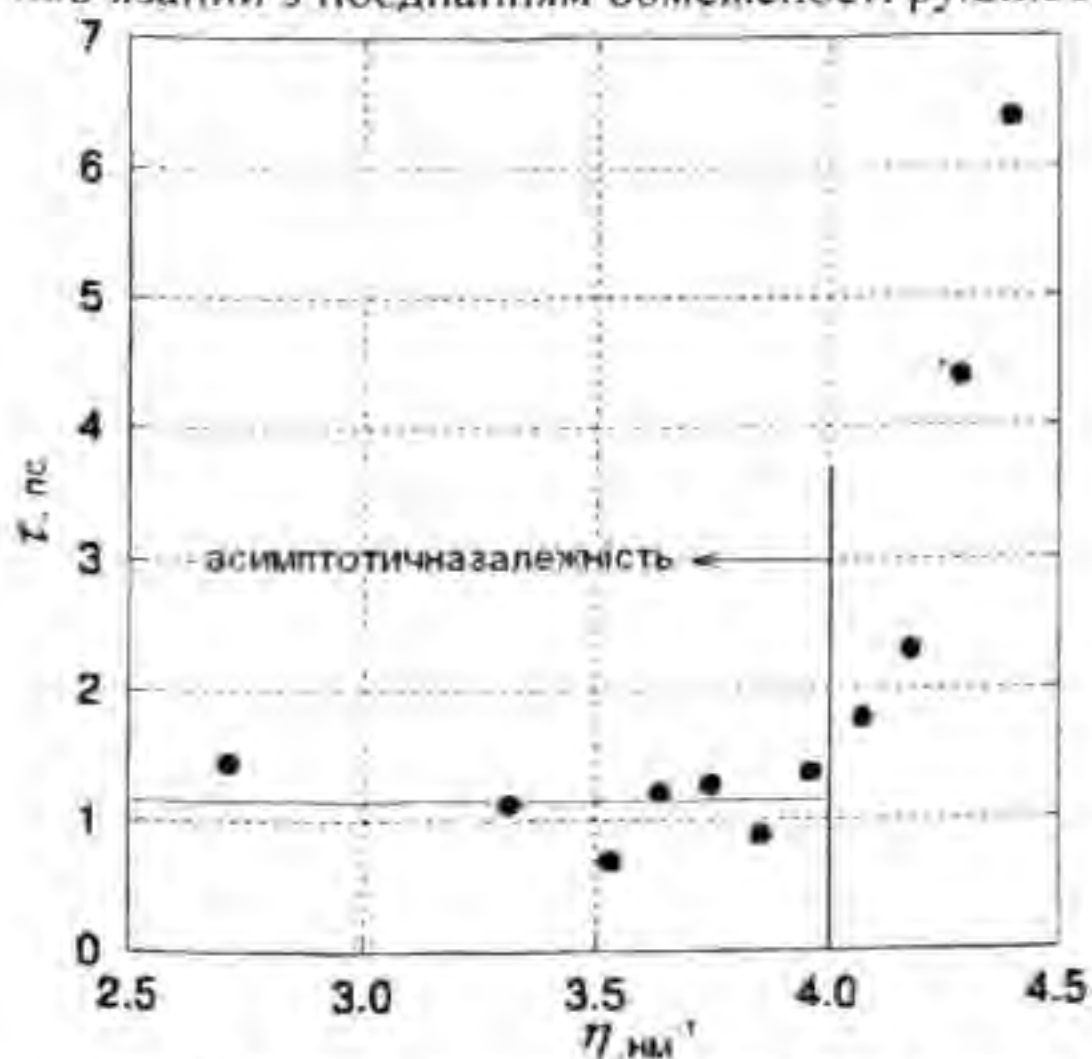


Рис.4. Залежність часу життя водневого зв'язку між молекулами H₂O від густини η молекул води у (6,6) CNT^[11]

молекул води в CNT і особливої молекулярної структури води в нанотрубі. Дослідження залежностей $C_{HB}(t)$ і $N_{HB}(t)$ від густини молекул води в CNT (Рис.3) виявило закономірність [3]: спадання $C_{HB}(t)$ супроводжується зростанням $N_{HB}(t)$. Крім того, для 4^{ох} досліджуваних значень густини молекул води в CNT справджується співвідношення:

$$C_{HB}(t) + N_{HB}(t) = 1 \text{ при } t \text{ до } 15 \text{ пс}$$

Це значить, що за час 15 пс молекули H₂O водневі зв'язки між якими зруйновані не «відходять» одна від одної, внаслідок густого пакування молекул води (як у вільній воді), а повертаються від характерної для Н зв'язку орієнтації за рахунок теплових флуктуацій.

На Рис.4. зображено час життя τ водневого зв'язку між молекулами H₂O як функцію густини молекул води у CNT [3]. Починаючи з густини 4 нм⁻³ спостерігається різке зростання величини τ , що автори статті Itsuo Hanasaki та інш. пояснюють зменшенням рухливості молекул води. Відповідно водневому зв'язку складніше зруйнуватися при зростанні густини молекул H₂O. Однак зменшення рухливості молекул води не є достатньою умовою збільшення часу життя водневого зв'язку між ними. Необхідно щоб і кути орієнтації молекул H₂O були стійкі і відповідали конфігурації водневого зв'язку. В протилежному випадку: зменшення рухливості і стійкості кутів, що відповідають за утворення Н – зв'язку призведе до зменшення часу τ (за даними [5] це відповідає випадку CNT з великим діаметром).

Для малих густин (< 4 нм⁻³) τ коливається біля 1 пс, що на 0,2 пс [5] більше ніж для вільної води. Відповідно водневий зв'язок між молекулами води у CNT є стабільніший ніж у вільній воді [3].

На більшу стабільність водневих зв'язків у CNT ніж у вільній воді також вказує робота [6], де автори при поясненні базуються на більш густому пакуванні молекул H₂O та частковому «екрануванні» їх стінками вуглецевої нанотруби. Важливою характеристикою водневих зв'язків є їх напрямленість відносно, осі CNT та залежність колективного характеру їх орієнтації з часом. Автори статті [6] дослідили колективну орієнтацію водневих зв'язків в CNT. За характеристику прийняли усереднене значення кута ϕ між дипольним моментом молекули води D_{H_2O} та віссю вуглецевої нанотруби. Дослідження часової поведінки значення кута ϕ

в середині вуглецевих нанотруб різної хіральності (діаметра) показало: для CNT

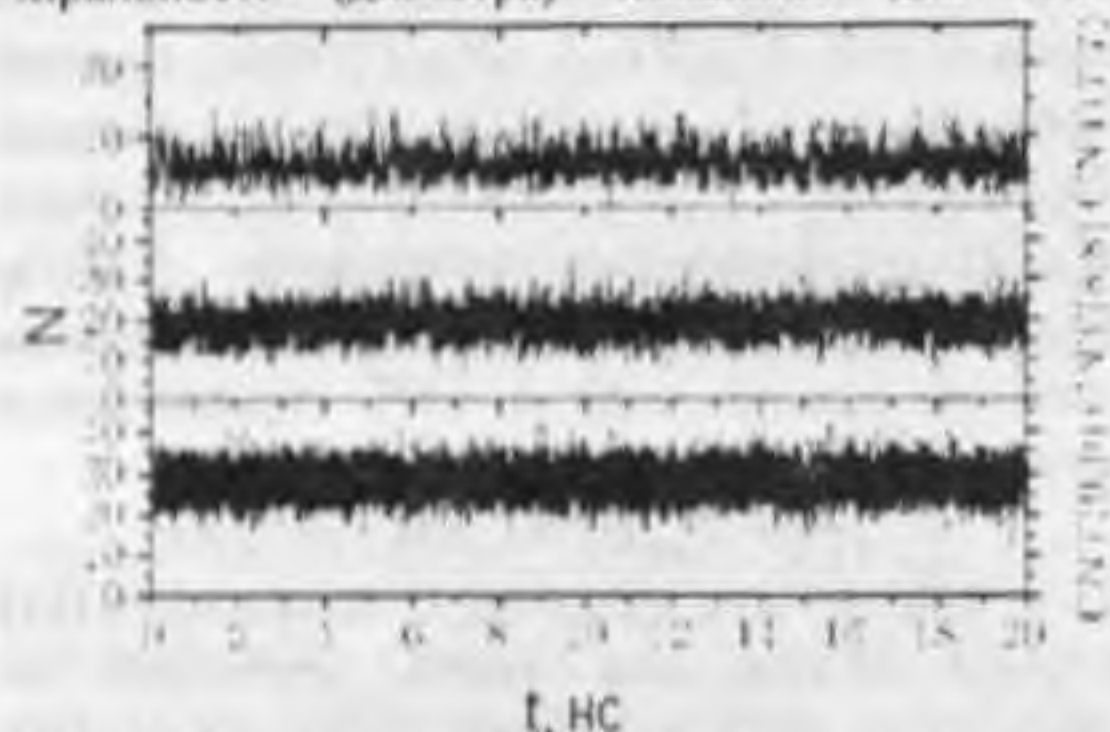


Рис.5. Залежність кількості водневих зв'язків між молекулами води в CNT від часу [6]

хіральністю (6,6) значення кута φ звичайно міститься в одному з 2-ох інтервалів: $15^\circ < \varphi < 50^\circ$ чи $130^\circ < \varphi < 165^\circ$. Однак з зростанням хіральності CNT до (8,8) відбувається переорієнтація D_{H2O} , значення кута φ переважний час міститься в проміжному інтервалі $50^\circ < \varphi < 130^\circ$. А для (9,9) CNT

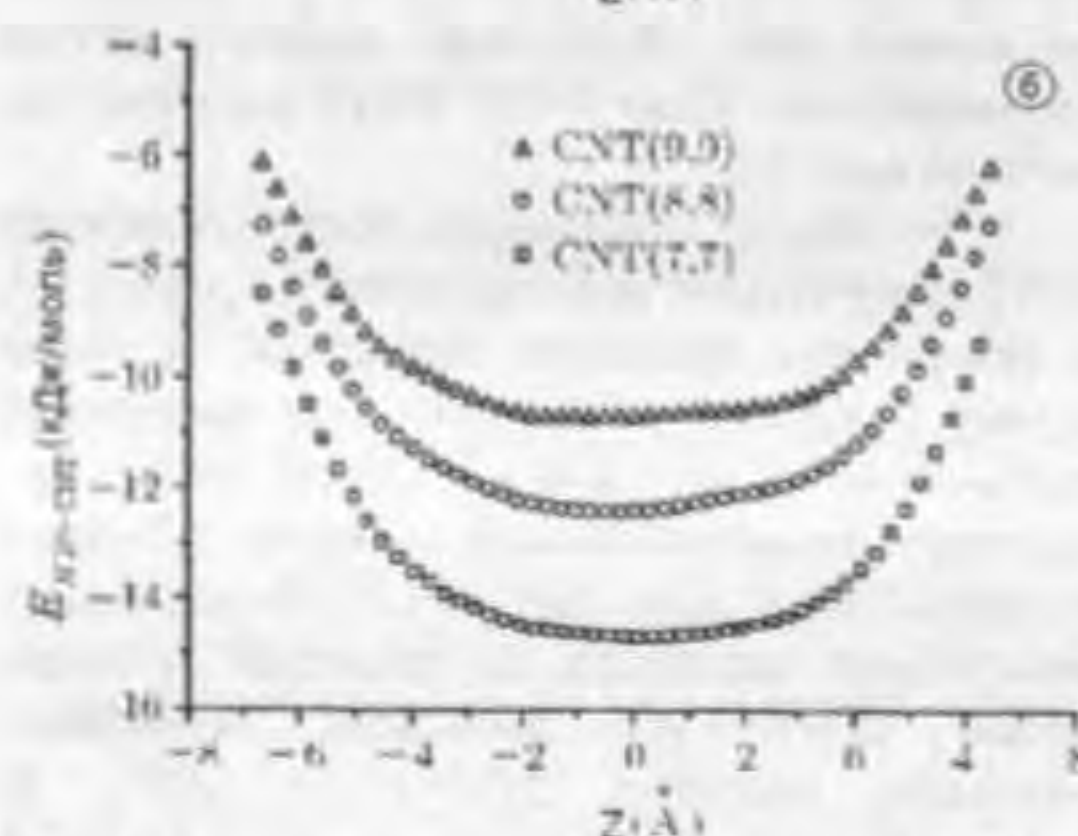
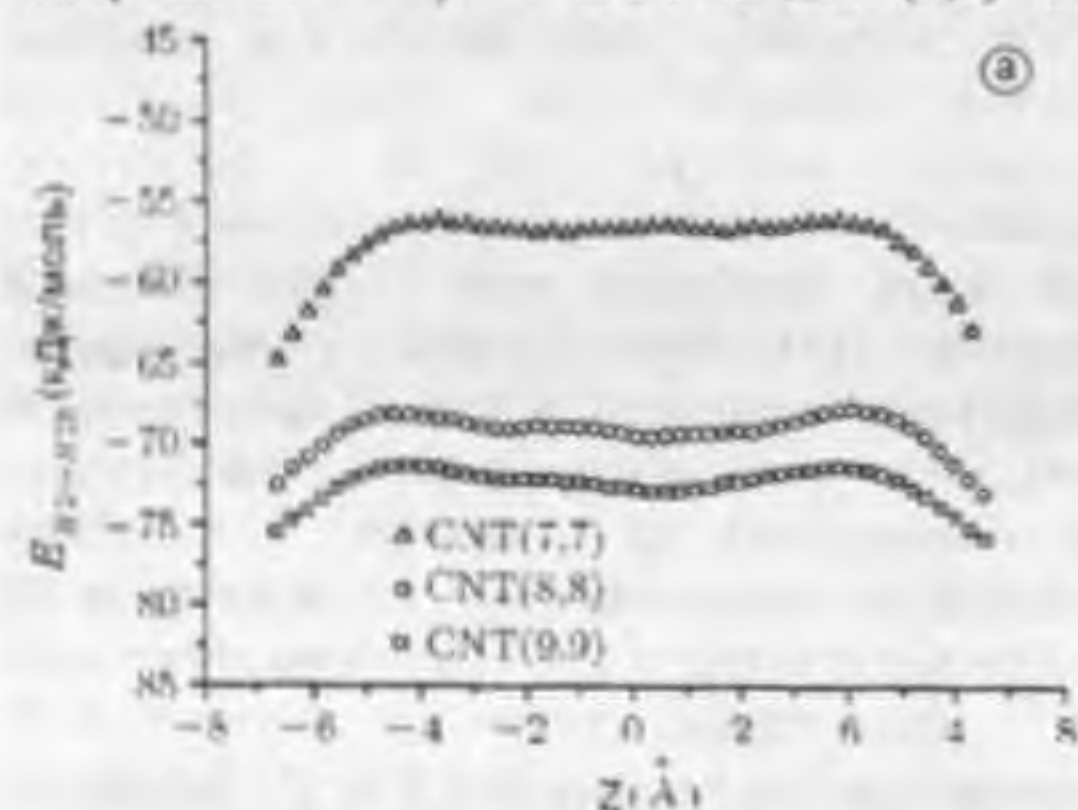


Рис.6. Середні значення енергії взаємодії між молекулами води (а) та молекулами води і атомами вуглецю(б) [6]

начення кута φ весь час припадає на проміжний інтервал: $50^\circ < \varphi < 130^\circ$. Така переорієнтація

D_{H2O} (визначає величину кута φ) з збільшенням діаметра вуглецевої нанотруби пов'язана з послабленням впливу теплового шуму на водневі зв'язки, внаслідок збільшення густини «пакування» молекул води.

Зростання кількості молекул води і щільності їх пакування всередині CNT призводить до зростання середньої кількості водневих зв'язків між молекулами H_2O у CNT (Рис.5) з 6,34 для (7,7) CNT до 27,99 для (9,9) CNT [6]. В перерахунку на 1 молекулу води це від 0,8 до 1,2 водневих зв'язків. Однак ця кількість флюктує з часом і в розглядуваній роботі [6] не розглядається «крайовий ефект» (водневі зв'язки між молекулами води у вільній воді та на початку вуглецевої труби). Для порівняння, з спектроскопічних досліджень [33], при $25^\circ C$ на кожну молекулу вільної води припадає в середньому 3,3 (3,6) водневих зв'язки.

в) Енергетика

Основний вклад в вільну енергію системи вода – CNT вносять дві складові: енергія взаємодії між молекулами води $E_{H2O-H2O}$ і енергія взаємодії між молекулами води та атомами вуглецю $E_{H2O-CNT}$. Проведені [6] дослідження показали (Рис.6):

Зростання ($\uparrow$) радіусу CNT призводить до:

- $\uparrow$ кількості молекул H_2O
- $\uparrow$ кількості Н - зв'язків між H_2O
- $\uparrow E_{H2O-H2O}$

Зростання $E_{H2O-H2O}$ супроводжується зменшенням енергії $E_{H2O-CNT}$, що пояснюється зростанням відстані між стінкою вуглецевої нанотруби і молекулами H_2O .

Такий зв'язок між радіусом і $E_{H2O-H2O}$ та $E_{H2O-CNT}$ є визначальним для транспорту молекул води через CNT.

Подяка

В. Королович, К. Мороз, С. Архіпов висловлюють щирі вдячність своєму вчителю проф. Ірині Іванівні Адаменко за цінні знання та поради, чуйність та увагу яку вона багато років приділяла колективу науковців, що займався проблематикою фізики рідин та нанорозмірних

рідинних систем на кафедрі молекулярної фізики Київського університету імені Тараса Шевченка.

Висновки:

- Молекулярна структура води в одностінних вуглецевих нанотрубах хіральністю від (6,6) до (10,10) має дві загальні риси: 1) визначається діаметром CNT і в залежності від нього утворює молекулярні структури від одномірного ланцюжка до більш складних; 2) має хвилеподібний розподіл молекул вздовж осі вуглецевої нанотруби.
- Зменшення діаметру вуглецевих нанотруб супроводжується зростанням часу життя водневого зв'язку між молекулами води і переорієнтацією дипольного моменту молекул води D_{H_2O} . Значення кута φ , що визначає орієнтацію D_{H_2O} , для CNT хіральністю (9,9) припадає $50^\circ < \varphi < 130^\circ$, а для (6,6) CNT $15^\circ < \varphi < 50^\circ$ чи $130^\circ < \varphi < 165^\circ$. Це пояснюється збільшенням густини «пакування» молекул води і «екрануючим ефектом» вуглецевої нанотруби.
- З зростанням діаметру вуглецевих нанотруб молекули води віддаляються від стінок CNT утворюючи молекулярні структури з розгалуженою сіткою водневих зв'язків, що супроводжується зростанням $E_{H_2O-H_2O}$ і спаданням E_{H_2O-CNT} .

Список використаної літератури

1. Wong A., Chan M. Liquid-vapor critical point of ^4He in aerogel. // Phys. Rev. Letter. – 1990. – Vol.65. – P.2567-2570
2. Булавин Л.А. Исследование самодиффузии молекул воды в ограниченных объемах методом квазиупругого рассеяния медленных нейтронов. // ФЖС. – 1992. - №20. – С.124-129.
3. Itsuo Hanasaki, Akihiro Nakamura, Toru Yonebayashi and Satoyuki Kawano. Structure and stability of water chain in a carbon nanotube J. Phys.: Condens. Matter 20 (2008) 015213-7pp
4. Hummer G, Rasaiah J C and Noworyta J P "Water conduction through the hydrophobic

channel of a carbon nanotube" Nature 2001, Nov 8; 414(6860): 188–90

5. Hanasaki I and Nakatani A. "Hydrogen bond dynamics and microscopic structure of confined water inside carbon nanotubes" J. Chem. Phys. 2006, 124 174714 (9p)
6. Zhou Xiao-Yan and Lu Hang-Jun «The structure and dynamics of water inside armchair carbon nanotube" Chine Phys. V.16, No2, 2007, 0335 - 05
7. Marcin Kosmider, Marius Sokol, Zbigniew Dendzik, Zygmunt Gburski "Structural and Dynamic properties of water confined inside a single – walled carbon nanotube. Molecular dynamics stud" Materials Science-Poland. Vol.23, No. 2, 2005
8. Yu.I. Prylutsky, L.Yu. Matzui, D.A. Gavryushenko and V.M. Sysoev, P.Scharff "Fluid Dynamics in Subnanometer Channels of Carbon Nanotubes" Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 13; 287-291, 2005
9. A. Striolo, A.A. Chialvo, K.E. Gubbins, P.T. Cummings "Water in carbon nanotubes: Adsorption isotherms and thermodynamic properties from molecular simulation" The J. of Chem. Phys. 122, 234712 (2005).
10. John A. Thomas and Alan J.H. McGaughey "Water Flow in Carbon Nanotubes: Transition to Subcontinuum Transport" PRL 102, 184502 (2009)
11. Yingchun Liu and Qi Wanq "Transport behavior of water confined in carbon nanotube", Phys. Rev. B 72, 085420 (2005)
12. J.Marti, M.C. Cordillo "Effect of confinement on the vibrational spectra of liquid water adsorbed in carbon nanotubes" Phys.Rew.B., V.63, 165430
13. Guoxin Cao, Yu. Qiao, Qulan Zhou and Xi Chen "Infiltration behaviour of water in a carbon nanotube under external pressure"

- Philosop.Magazine Letters, Vol. 88, No.5., May 2008, 371-378
14. H.Kuzmany, R.Pfeiffer, F. Simon, Ch. Kramberger and M. Hulman, P. Costa "Physics and Chemisrty Inside Nanotubes" Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 13; 179-188, 2005
15. Daisuke Takaiwa, Itaru Hatano, Kenichiro Koga and Hideki Tanaka "Phase diagram of water in carbon nanotubes" /www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.0707917105
16. Saito Y and Bandow S 1998 Introduction to Carbon Nanotubes (Tokyo: Corona Publishing) (in Japanese)Eng. 14 S9-20
17. Haiping Fang, Rongzheng Wan, Xiaojing Gong, Hangjun Lu and Songyan Li " Dynamics of single-file water chains inside nanoscale channels: physics, biological significance and applications" J.Phys.D: Appl.Phys.42 (2008) 103002 (16pp)
18. Sansom M S P and Biggin P C "Biophysics: Water at the nanoscale", Nature 414, (2001) 156-159.
19. Berendsen H.J.C., Grigera J.R., Straatsma T.P. "The missing term in effective pair potentials". J. Phys. Chem. 1987, 91 (24), 6269-6271
20. Werder T, Walther J H, Jaffe R L, Halicioglu T and Koumoutsakos P. "On the water-Carbon Interaction for use in Molecular Dynamics Simulation of Graphite and Carbon Nanotubes" J. Phys. Chem. B, 2003, 107(6), p.1345-52
21. Jorgensen W. L. "Revised TIPS for Simulation of Liquid Water and Aqueous Solution" J. Chem. Phys. 77 4156 (1982)
22. Jorgensen W. L., J. Chandrasekhar, J. D. Madura, R. W. Impey and M. Klein "Comparison of simple potential function for simulating liquid water" J. Chem. Phys. 79, 926, 1983, (10 p)
23. Hanasaki I and Nakatani A "Water flow through carbon nanotube junction as molecular convergent nozzle" 2006 Nanotechnology 17 2794-804
24. Erik Lindahl Berk Hess D. van der Spoel «GROMACS 3.0: a package for molecular simulation and trajectory analysis», J. Mol. Model.-2001.
25. Mart'ý J. and Gordillo M. C. " Time-dependent properties of liquid water isotopes absorbed in carbon nanotubes", J. Chem. Phys. 2001, 114 10486-92
26. Marañon Di Leo J and Marañon J 2003 J. Mol. Struct. 623 159-66
27. Sarkisov G.N., Dashevsky V.G., Malenkov G.G. Mol. Phys. 27 1249 (1974)
28. Wan R Z, Li J Y, Lu H J and Fang H P 2005 J. Am.Chem. Soc. 127 7166
29. Tajkhorshid E. "Control of the Selectivity of the Aquaporin Water Channel Family by Global Orientation Tuning", 2002 Science V. 296, 5567, p.p. 525 - 530
30. J.H. Walther, R. Jaffe, T.Halicioglu and P.Koumoutsakos «Carbon nanotubes in Water: structural Characteristics and Energetics» J. Phys. Chem. B. 2001, 105, 9980-9987
31. Gordillo, M. C.; Mart'ý, J. Chem. Phys. Lett. 2000, 329, 341-345.
32. Hanasaki I and Nakatani A "Flow structure of water in carbon nanotubes: Poiseuille type or plug-like?", 2006 J. Chem. Phys. 124 144708 (9p.p.)
33. Wernet P, Nordlund D, Bergmann U, Cavalleri M, Odellius M, Ogasawara H, Nēaslund L .A, Hirsch T K, Ojam.ae L, Glatzel P, Pettersson L G M and Nilsson A 2004 Nature 304 995

Надійшла до редколегії 14.10.2010р

УДК 519.9

Булавін Л.А. д.ф.м.н., проф., Загородня О.А. к.ф.м.н., Перепелиця С.М. к.ф.м.н., Кравцова Т.А. студ.

Дослідження гомогенності систем вода - ДНК

За допомогою методу електрофорезу досліджено гомогенність водних розчинів ДНК різної концентрації після гідродинамічної обробки. Кількісний аналіз даних електрофорезу показав, що найбільш гомогенними є розчини, які 20 разів пропускалися через автоматичну піпетку, та які мають концентрацію не більше 0.001%.

Ключові слова: система ДНК – вода, гомогенний розчин, електрофорез

L.A. Bulavin Dr. Sci., Prof., O.A. Zagorodnia Ph.D., S.M. Perepelytsia Ph.D., T.A. Kravtsova stud.

Investigation of Homogeneity of DNA Water Solutions

Using the electrophoresis method the homogeneity of the DNA water solutions after hydrodynamic treatment has been studied. Quantitative analysis of electrophoresis data has been made and showed that solutions passed through the sampler 20 times having a DNA concentration lower than 0.001% are the most homogeneous systems.

Key Words: DNA – water system, homogeneous solution, electrophoresis

Структура подвійної спіралі молекули ДНК формується в присутності води та протіонів, які визначають фізичні властивості макромолекули, що є важливими в механізмах біологічного функціонування ДНК [1,2]. В сучасних дослідженнях системи ДНК-вода, як правило, використовують вологі плівки та водні розчини. В дослідженнях з використанням водних розчинів ДНК важливою є гомогенність системи, тобто розчин повинен складатися з окремих макромолекул, а не з їх комплексів. В даній роботі досліджується гомогенність водних розчинів ДНК різної концентрації.

В лабораторних умовах розчини молекули ДНК одержуються шляхом розчинення сухого препарату у воді. Протягом декількох діб сухий препарат ДНК вбирає в себе воду. Після цього утворюється рідина, в'язкість та прозорість якої залежать від концентрації ДНК та її молекулярної маси. Така система складається з комплексів макромолекул ДНК, які повністю не розчинилися. Для одержання гомогенного розчину з окремими макромолекулами ДНК необхідно провести додаткову обробку. Існує декілька методів такої обробки: механічна, ультразвукова та гідродинамічна. Механічна обробка полягає у перемішуванні розчину протягом декількох годин [3]. Недоліком цього методу є те, що для його здійснення затрачується великий час, а перевага в тому, що молекулярна маса ДНК практично не змінюється і структура подвійної спіралі не пошкоджується. Ультразвукова обробка полягає в опроміненні

ультразвуком розчину порціями по декілька хвилин [4]. Недоліком такої обробки є те, що зразок нагрівається, а це призводить до руйнування структури макромолекули та їх фрагментації. Тому для контролю стану подвійної спіралі необхідно проводити додаткові дослідження. Перевага цього методу полягає в швидкості досягнення гомогенності розчину. Гідродинамічний метод полягає в пропусканні розчину через тонкий капіляр декілька разів [3]. Ефективність цього методу залежить від властивостей капіляру та концентрації ДНК, тому для визначення гомогенності розчину необхідно проводити окреме дослідження у кожному випадку. Метою даної роботи було дослідити гомогенність водних розчинів ДНК різної концентрації, оброблених гідродинамічним методом для визначення найбільш ефективного способу обробки.

Для приготування зразків використовувалася молекула ДНК з тимусу теляти у висушеному стані. Сухий препарат ДНК спочатку розчинили у дистильованій воді до концентрації 0.1% по масі протягом тижня при температурі 4 °С. Потім масі протягом тижня при температурі 4 °С. Потім з цього розчину приготували п'ять зразків з концентраціями 0.01%, 0.005%, 0.001%, 0.0005%, 0.0001% маси відповідно. Усі зразки готувались в стерильних умовах. Гомогенність розчину досягалася шляхом пропускання розчину через піпетку. Для визначення оптимальної кількості разів пропускання досліджувалися три серії розчинів. В першу серію входили розчини без гідродинамічної обробки. До другої та третьої

серій входили розчини, які пропускалися через піпетку 10 та 20 разів відповідно. Для визначення найбільш гомогенного розчину використовувався метод електрофорезу. Електрофорез ДНК проводився в камері довжиною 7 см заповненій гелем агарози з концентрацією 0.9%. До електродів прикладалася напруга 50 В протягом 2 годин. Результати електрофорезу наведено на рисунку 1. З фотографії електрофорезу видно, що розчини ДНК в концентраційному діапазоні від 0.005% по масі і більше розчиняються погано, про що свідчать інтенсивні лінії на старті. Починаючи з концентрації 0.001% інтенсивність на старті зменшується, що свідчить про те, що ДНК поступово розчиняється. Для проведення кількісного аналізу одержаних даних було застосовано спеціальну програму GelPro45, за допомогою якої побудовано залежності інтенсивності від відстані, яку проходить ДНК в гелі.

Графік залежності інтенсивності від шляху практично однаковий в діапазоні концентрацій від 0.005% до 0.1% і майже не змінюється після гідродинамічної обробки. Для прикладу, на Рис. 2а показана залежність інтенсивності від відстані для випадку розчину 0.01% мас ДНК після 20-кратної обробки. Як бачимо, спостерігається лише один пік на початку доріжки, що свідчить про те, що вся ДНК знаходиться на старті (доріжка №4). Така особливість пов'язана з тим, що розчин складається з комплексів молекул ДНК, які не розчинилися і тому не можуть проникати крізь пори гелю агарози. Для розчинів з концентрацією менше 0.001% залежність інтенсивності від відстані має інший характер. На Рис. 2б показана ця залежність для випадку розчину ДНК з концентрацією 0.0005% після 20-кратної обробки. Як бачимо, ДНК поступово уходить зі старту, про що свідчить зменшення інтенсивності піку і рівномірне розподілення інтенсивності вздовж усієї доріжки №13.

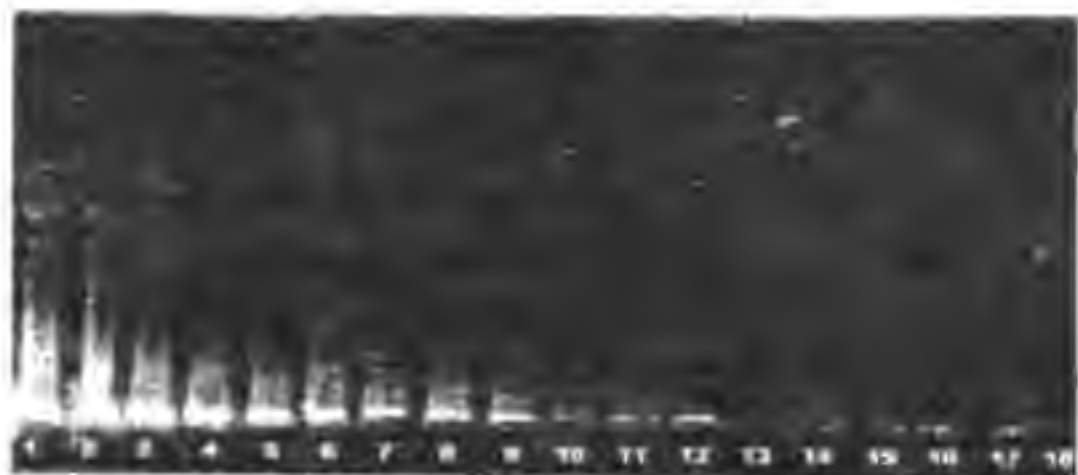


Рис. 1. Результати електрофорезу ДНК. Доріжки: 1 – 0.1% (20-кратна обробка), 2 – 0.1% (10-кратна обробка), 3 – 0.1% (без обробки), 4 – 0.01% (20), 5 – 0.01% (10), 6 – 0.01%, 7 – 0.005%(20), 8 – 0.005% (10), 9 – 0.005%, 10 – 0.001% (20), 11 – 0.001% (10), 12 – 0.001%, 13 –

0.0005% (20), 14 – 0.0005% (10), 15 – 0.0005%, 16 – 0.0001% (20), 17 – 0.0001% (10), 18 – 0.0001%.

Порівнюючи отримані графіки для інтенсивностей з калібровочною кривою, побудованою на основі електрофорезу фагу λ [5], було визначено молекулярну масу ДНК в розчинах. Виявилось, що середня молекулярна маса ДНК має значення біля $4.5 \cdot 10^6$, а.о.м. Проведені нами розрахунки розміру клубків макромолекул ДНК з використанням персистентної моделі полімерного ланцюга [6] показали, що в діапазоні концентрацій нижче 0.001% маси ДНК клубки не перекриваються між собою. Тобто розчин є розбавленим.

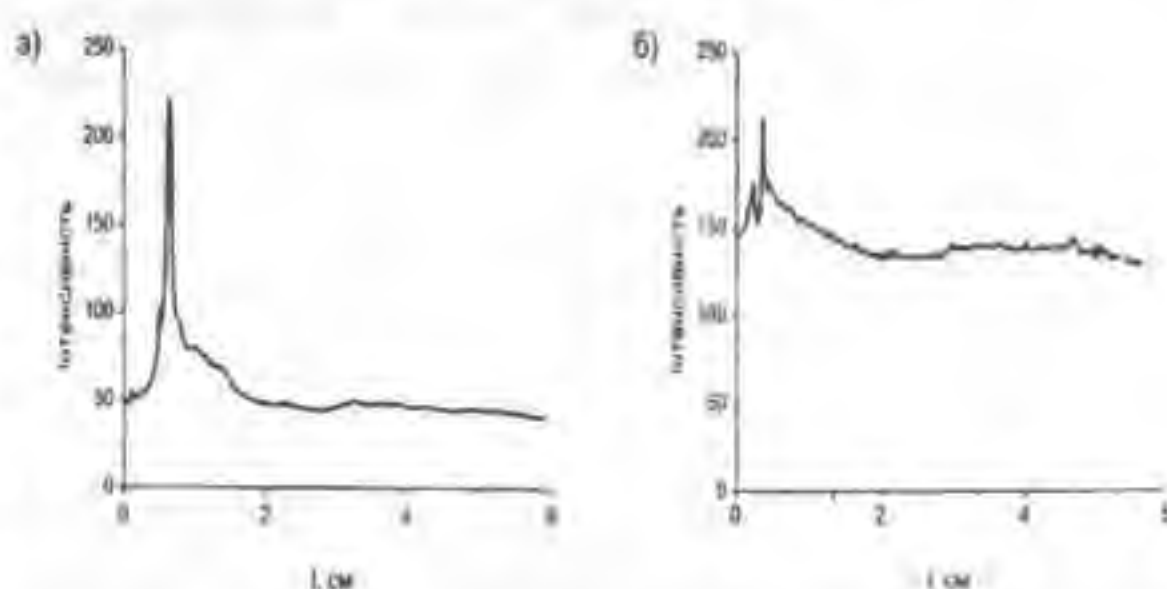


Рис. 2. Залежність інтенсивності від відстані проходження ДНК. (а) Концентрація ДНК 0.01% (доріжка №4), (б) Концентрація ДНК 0.0005% (доріжка №13). Обидва розчини після 20-кратної обробки.

Таким чином, проведені дослідження показали, що в діапазоні концентрацій ДНК нижче 0.001%, який відповідає розбавленому режиму розчину, для досягнення гомогенності достатньо пропустити розчин через автоматичну піпетку 20 разів. При вищих концентраціях ДНК у розчині даний спосіб гомогенізації не є ефективним.

1. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. - М.: Мир, 1987. - 584 с.
2. Малеев В.Я. Крутильные колебания оснований в нуклеиновой кислоте // Биофизика. - 1965. - Т. 10, № 5. - С. 729 - 734.
3. Фрайфелдер Д. Физическая биохимия. - М.: Мир, 1980. - 580 с.
4. Эльпинер И.Е. Ультразвук. Физико-химическое и биологическое действие. - М.: Физматгиз, 1963. - 420 с.
5. Перепелица С. М. Роль протіонів лужних металів у конформаційній динаміці двоспінальних нуклеотидів. Дис. кфмн. - Київ, 2007. - 138 с.
6. Благон Ю.П. и др. Комплексы нуклеиновых кислот в растворах. - Киев: Наукова думка, 1991. - 272 с.

Надійшла до редколегії 12.10.2010р

УДК 537.311.322

Т.В. Горкавенко, інженер,
С.М. Зубкова, д.ф.-м.н.,
В.А. Макара, д.ф.-м.н., професор,
Л.М. Русіна, к.ф.-м.н.,
О.В. Смельянський, інженер

Електронні властивості поверхні (111) в A^3B^5 та A^2B^6 кристалах

Для полярної поверхні (111) в кристалах типу A^3B^5 і A^2B^6 : GaAs, ZnSe досліджено електронну зонну структуру, локальну густину станів (повну та пошарову), а також розподіл зарядової густини валентних електронів. Окремо розглянуто властивості поверхонь, що закінчуються катіоном та аніоном. Чисельний розрахунок проведено самоузгодженим "тривимірним" методом псевдопотенціала в рамках моделі шаруватої надгратки. В процесі самоузгодження використано оригінальний ітератор, який дозволяє подолати труднощі, обумовлені наявністю в разі поверхні векторів оберненої ґратки, менших 1 ат.од.
Ключові слова: поверхня, зонна структура, густина електронних станів, густина заряду валентних електронів

E-mail: gorka@univ.kiev.ua, svzubkova@ukr.net

1 Вступ

В літературі [1] для вивчення поверхневих станів застосовуються в основному три методи: метод зв'язуючих орбіталей, метод сильного зв'язку і самоузгоджений псевдопотенціальний метод. Метод зв'язуючих орбіталей почав використовуватись в 70-х роках для розрахунку поверхні (111) в елементарних напівпровідниках (Si, Ge) і не одержав широкого розповсюдження [2]. Несамозгоджений метод сильного зв'язку, вперше запропонований Слетером і Костером в 1954 році [3], був застосований в [4] для розрахунку електронної структури (001) поверхонь для всіх відомих з експериментальних даних типів реконструкцій, а також ідеальних поверхонь (110) і (111) кубічного карбїду кремнію. Задача розглядалась в наближенні шаруватої надгратки. Як відмічають автори, метод сильного зв'язку добре описує валентну зону і

T.V. Gorkavenko, engineer,
S.M. Zubkova, PhD,
V.A. Makara PhD,
L.N. Rusina, PhD,
O.V. Smelyansky, engineer

Electronic properties of (111) surface of A^3B^5 and A^2B^6 - type crystals

The electronic band structure, the local density of states (full and layer-resolved) and the charge density distribution of valence electrons of the (111) polar surface in crystals of A^3B^5 and A^2B^6 - type: GaAs, ZnSe have been investigated. The properties of anion and cation - terminated surfaces were studied separately. The self-consistent pseudopotential method with the original iterator within bounds of the layered superlattice model was used.

Key words: surface, band structure, density of states, charge density distribution of valence electrons

незадовільно – заборонену та зону провідності.

П'ять різних конфігурацій полярних β -SiC поверхонь (001) були розраховані в [5] з перших принципів самоузгодженим методом з використанням гладких, сепарабельних, зберігаючих норму псевдопотенціалів, в наближенні локальної щільності в теорії функціонала щільності.

Аналогічним методом були розраховані поверхневі енергії та передбачені види реконструкцій актуальних поверхонь різних об'ємних фаз оксиду цирконію ZrO_2 .

В [6] було вперше проведено самоузгоджений псевдопотенціальний розрахунок в моделі шаруватої надгратки (110) поверхонь в напівпровідниках ZnSe і GaAs із структурою цинкової обманки. Розрахунок підтвердив результати експериментів на зразках GaAs по фотоемісії, спектроскопії енергетичних втрат, еліпсометрії та ін., які вказують на існування двох поверхневих станів, пов'язаних з обірваними зв'язка-

ми: зайнятий поверхневий стан, розташований на 0.5 eV нижче максимуму валентної зони на атомі As, і пустий поверхневий стан, розташований на (0.8 – 1) eV вище максимуму валентної зони на атомі Ga. Було показано, що (110) поверхня є напівпровідниковою.

Якщо на поверхні GaAs (110) спостерігається тільки релаксация поверхневих атомів Ga і As [7], то на поверхні GaAs (001) існує широкий спектр структур в залежності від хімічного складу поверхневого шару та способів приготування поверхні. В [8] в рамках псевдопотенціального метода в моделі шаруватої надгратки досліджена атомна та електронна структури чотирьох структурних реконструкцій поверхні GaAs (001).

Поверхнева енергетика елементарних напівпровідників Ge, Si та алмазу з різними типами реконструкцій 1x1, 2x1, c(4x2), c(2x8) та 7x7 поверхонь (100), (110) та (111) вивчалась з перших принципів на основі псевдопотенціального методу. Одержано повні енергії та відповідні зонні структури. Поведінка різних реконструкцій аналізувалась в термінах атомних розмірів та орбітальних енергій [9].

В останні роки велика увага приділяється вивченню поверхневих властивостей та інтерфейсів у вузькозонному напівпровіднику InN з $E_{gap} \approx 0,65$ eV, в якому виявлена здатність максимально акумулювати електрони на чистій поверхні InN (0001), чого не спостерігається в більшості III-V-матеріалів. Експериментально встановлено, що електрони в цьому акумулюючому шарі InN (0001) створюють окрему підзону. Сплав InN із широкозонним напівпровідником GaN ($E_{gap} \approx 3,4$ eV) відкриває нові можливості в зонній інженерії [10],[11].

Поряд з вивченням в рамках теорії функціоналу густини електронних та оптичних властивостей основного стану поверхні кристалів почались дослідження збуджених поверхневих станів з використанням багаточастинкової теорії збурень. Такі розрахунки вже зроблені для двовірних систем з елементів IV групи, наприклад, чистої поверхні кремнію, графену, поверхні C(111)2x1 [12],[13].

Повна та в окремих шарах густина станів ідеальної поверхні (111) в напівпровідниках типу A^2B^6 і A^3B^5 із структурою цинкової обманки досліджувалась методом зв'язуючих орбіталей

в AlP [2], методом сильного зв'язку в GaAs та ZnSe [14], методом лінійної комбінації атомних орбіталей в GaN [15].

В даній роботі для вивчення електронної структури поверхні (111) подібних кристалів застосовано "тривимірний"самоузгоджений псевдопотенціальний метод в моделі шаруватої надгратки, яка була вперше застосована в [16] для поверхні (111) кремнію. В цьому разі тверде тіло, обмежене плоскою поверхнею, моделюється у вигляді шаруватої надгратки, тобто системи тонких плівок з 5 – 20 та більше атомними шарами, що періодично повторюються в напрямку, перпендикулярному поверхні і розділені вакуумними проміжками. Величина вакуумного проміжку обирається такою, щоб можна було знехтувати взаємодією сусідніх плівок.

Ця модель значно зручніша за модель напіввскінченного кристала, тому що штучно наведена тривимірна трансляційна симетрія, тобто періодичність в напрямку, перпендикулярному поверхні кристала, дозволяє застосувати до розрахунку електронної структури поверхні добре розроблені "тривимірні"методи.

(111)-поверхня сполук типу A^2B^6 і A^3B^5 із структурою сфалериту представляє собою особливий випадок полярної поверхні, коли атом тільки одного сорту – катіон або аніон – розташований на поверхні. Полярну поверхню можна уявити як паралельні площини, які чергуються і вміщують атоми тільки одного сорту. В напрямку [111] атомні шари утворюють гексагональні плоскі ґратки, які розділені проміжками $1/4; 1/12; 1/4; 1/12; 1/4 \dots$ великої діагоналі куба. Тут збільшення ступеня іонного зв'язку при переході від однієї сполуки до іншої, тобто збільшення асиметрії зв'язку являється найважливішим фактором, який визначає особливості електронної енергетичної структури. В нашому випадку періодично розташованих плівок з парним числом атомних шарів катіон і аніон лежать на протилежних поверхнях плівки.

2 Метод розрахунку

Велика подовжена елементарна комірка [16] вибиралася так, що в двох вимірах вона визначається найкоротшими векторами прямої ґратки, тобто векторами довжиною $a\sqrt{2}/2$, де a – постійна ґратки кристалу. У третьому вимірі ви-

бирається довга c -вісь, яка проходить в напрямку $[111]$ через велику діагональ куба (таким способом кубічна структура сфалериту розглядається як гексагональна) і охоплює M атомних та N порожніх шарів. Числа M і N обираються так: 1) плівка повинна бути достатньої товщини, для того щоб можна було знехтувати взаємодією поверхонь з обох її боків; 2) поверхневий потенціал повинен загасати в "вакуумі" так, щоб на нього не впливали інші періодично розташовані плівки. Тестові розрахунки показали: $M = 12$, $N = 4$, тоді для c маємо $c = 5a\sqrt{3}/2$. Вибір 12 атомних шарів гарантує, що пластина вміщує ціле число незвідних кристалічних шарів, що включають у випадку ідеальної поверхні (111) по шість атомних шарів одного типу.

Таким чином, задача полягає в самоузгодженому розрахунку електронної структури "періодичної" системи, в якій гексагональна комірка містить 12 атомів для переконструйованої структури.

Хвильова функція представлена у вигляді:

$$\psi_{\vec{k}}^n = \sum_{\vec{G}} a_{\vec{k}}^n(\vec{G}) e^{i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}}, \quad (1)$$

де n – номер зони.

Система рівнянь метода псевдопотенціалу має стандартний вигляд:

$$\sum_{\vec{G}} (H_{\vec{G}, \vec{G}'} - E \delta_{\vec{G}, \vec{G}'}) a_{\vec{k}}(\vec{G}) = 0, \quad (2)$$

$$H_{\vec{G}, \vec{G}'} = |\vec{k} + \vec{G}|^2 \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + V_{ps}(\vec{G}, \vec{G}'). \quad (3)$$

Самоузгодження починається з емпіричного псевдопотенціалу:

$$V_{emp}(\vec{G}) = S(\vec{G}) V_{emp}^{at}(|\vec{G}|), \quad (4)$$

$$S(\vec{G}) = \frac{1}{M} \sum_{\tau_i} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_i} \quad (5)$$

структурний фактор, який описує розташування атомів у "великій" елементарній комірці. $V_{emp}^{at}(|\vec{G}|)$ – значення форм-факторів, одержаних з неперервної кривої [17]:

$$V(q) = \frac{a_1(q^2 - a_2)}{e^{a_3(q^2 - a_4)} + 1}, \quad (6)$$

¹ На практиці при чисельних розрахунках розбіжність Хартрі-Фоківського та іонного потенціалів при малих хвильових векторах решітки в поверхневій задачі порушує стабільність і ускладнює процес самоузгодження. Більш детально ми розповімо про це нижче.

Чотири параметри a_i були визначені підгонкою $V(q)$ до відомих значень форм-факторів для об'ємного кристалу та їхнім перенормуванням. Форм-фактори для $\vec{G}$ -векторів поверхневої задачі були одержані неперервною екстраполяцією рівняння (6).

Розв'язок рівнянь (2), (3) дає енергії $E_n(\vec{k})$ та псевдохвильові функції, які визначаються рівняннями (1). Ці величини були одержані в 28 точках незвідної $(1/12)$ двомірної гексагональної зони Бріллюена.

Густина заряду валентних електронів розраховувалась на кожній ітерації за формулою

$$\rho(\vec{r}) = e \sum_{\vec{k}, n}^{\text{з.Бр.}} \Psi_{\vec{k}}^{n*}(\vec{r}) \Psi_{\vec{k}}^n(\vec{r}), \quad (7)$$

при цьому в суму по $\vec{k}$, n входять $E_n(\vec{k}) < E_F$.

Далі на основі $\rho(\vec{r})$ обчислювалися Хартрі-Фоківські екрануючі потенціали V_H і V_X . V_H є відштовхуючим кулонівським потенціалом, що описує дію на даний електрон всіх інших валентних електронів. Він визначається рівнянням Пуассона

$$\nabla^2 V_H(\vec{r}) = -4\pi e^2 \rho(\vec{r}) \quad (8)$$

і може бути представлений у вигляді:

$$V_H(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_H(\vec{G}) e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}, \quad (9)$$

$$\text{де } V_H(\vec{G}) = \frac{4\pi e^2 \rho(\vec{G})}{|\vec{G}|^2}. \quad (10)$$

Розбіжність $V_H(\vec{G})$ при $\vec{G} \rightarrow 0$ не має фізичного змісту, тому що вона повністю знищується іонним потенціалом, який генерується позитивними іонами:

$$V_{ion}^{at}(q) = (b_1/q^2) [\cos(b_2 q) + b_3] e^{b_4 q^4}. \quad (11)$$

Іонний потенціал одержано підгонкою атомного модельного потенціалу до значень атомних термів, як це зроблено Хейне та Абаренковим [18]. Таким чином, можна покласти¹ $V_H(\vec{G} = 0) = V_{ion}(\vec{G} = 0) = 0$.

Згідно із статистичною обмінною моделлю Слетера обмінний потенціал Хартрі-Фока в локальній формі має вигляд:

$$V_X(\vec{r}) = -3\alpha e^2 (3/8\pi)^{1/3} \rho^{1/3}(\vec{r}), \quad (12)$$

де $\alpha = 0.79$, як і в об'ємних розрахунках.

Функція $\rho^{1/3}(\vec{r})$ визначалась для кожної точки окремо в тривимірній сітці з $N = 21600$ точок $\vec{r}$ в елементарній комірі в реальному просторі. Далі функція $\rho^{1/3}(\vec{r})$ перетворювалася в Фур'є образ

$$\rho^{1/3}(\vec{G}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}_i} \rho^{1/3}(\vec{r}_i) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_i}. \quad (13)$$

Сума двох потенціалів V_H і V_X складає електронний екрануючий потенціал

$$V_{screen}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} [V_H(\vec{G}) + V_X(\vec{G})] e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}. \quad (14)$$

Розрахунок починається зі стартового емпіричного потенціалу (4), (5). В табл. 1 наведено параметри a_i емпіричних стартових потенціалів. Потенціали нормовані на атомний об'єм, який дорівнює об'єму нової великої елементарної комірки (16 шарів), поділеному на число атомів в комірі (12) – 190.2 ат.од. для ZnSe і 188.7 ат.од. для GaAs. Сталі ґратки ZnSe та GaAs відповідно дорівнюють 0.5650 і 0.5635 нм.

Т а б л и ц я 1. Параметри a_i емпіричного потенціалу для ZnSe та GaAs – (111) поверхонь (ряд).

№	Ga	As	Zn	Se
1	1.22	0.35	6.70	0.23
2	2.45	2.62	1.50	3.39
3	0.54	0.93	0.67	0.73
4	-2.71	1.57	-4.71	2.20

На другій ітерації вхідний потенціал дорівнює сумі іонного та екрануючого потенціалів. В табл. 2 наведені параметри b_i іонного основного потенціалу (11) ZnSe та GaAs.

Т а б л и ц я 2. Параметри b_i іонного основного емпіричного потенціалу для ZnSe та GaAs – (111) поверхонь (ряд).

№	Ga	As	Zn	Se
1	-0.34	-0.71	-0.31	-2.32
2	1.33	1.04	1.34	0.53
3	0.45	0.17	0.082	-0.57
4	0.0071	-0.015	-0.0086	-0.032

Таким чином, вхідні потенціали для першої та другої ітерації процедури самоузгодження

мають вигляд:

$$\begin{aligned} V_{in}^{(1)}(\vec{r}) &= V_{emp}(\vec{r}), \\ V_{in}^{(2)}(\vec{r}) &= V_{ion}(\vec{r}) + V_{screen}^{(1)}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (15)$$

У зв'язку з тим, що в розрахунку використовувався емпіричний потенціал $V_{emp}(\vec{r})$ для об'ємних кристалів, ми не одержали після першої ітерації, як і слід було очікувати, задовільний екрануючий заряд на поверхні. Дійсно, $V_{in}^{(2)}(\vec{r})$ дає спектр власних значень і заряд, які сильно відрізняються від результатів першої ітерації $V_{in}^{(1)}(\vec{r})$, і всі наступні кроки самоузгодження не призводять до збіжності результатів.

Справа в тому, що в об'ємній задачі найкоротший вектор оберненої ґратки $2\pi(111)/a$ має довжину > 1 ат.од., а в поверхневій задачі такий вектор дорівнює $2\pi/a_c < 1$ ат.од. Для таких векторів оберненої ґратки ітераційна система (15) є дуже нестабільною. Математично це проявляється в тому, що залежності $V_{out}(\vec{G}) = f(V_{in}(\vec{G}))$ для векторів оберненої ґратки з цього інтервалу представляють собою криві з великим кутом нахилу (часто з від'ємним).

У відповідності з іншими авторами [6, 7], обчислення вхідного потенціалу на $(n+1)$ ітерації як лінійної комбінації вхідного та вихідного потенціалів на n ітерації, не призводить до збіжності. Тому для одержання вхідного потенціалу $V_{in}^{(n)}(\vec{G})$ для $n > 2$ ми дослідили криві $V_{out}(\vec{G}) = f(V_{in}(\vec{G}))$ для кожного $|\vec{G}| < 1$ ат.од. окремо і запропонували наступну ітераційну процедуру. Проведемо в системі координат $x = V_{in}(\vec{G})$, $y = V_{out}(\vec{G})$ пряму через дві точки (x_1, y_1) і (x_2, y_2) , що відповідають вхідному і вихідному потенціалам для двох ітерацій, попередніх до третьої ітерації (x, y) , яку ми розглядаємо. Одержимо систему рівнянь:

$$\frac{x_1}{a} + \frac{y_1}{b} = 1 \quad \text{та} \quad \frac{x_2}{a} + \frac{y_2}{b} = 1, \quad (16)$$

звідки знаходимо постійні a і b :

$$a = \frac{x_2 y_1 - x_1 y_2}{y_1 - y_2}, \quad b = \frac{x_2 y_1 - x_1 y_2}{x_2 - x_1}. \quad (17)$$

Очевидно, збіжність відповідає рівності вхідного та вихідного потенціалів $x \cong y$, тому із системи рівнянь (16) одержимо умову для вхідного потенціалу в ітерації, що розглядається:

$$x = \frac{ab}{a+b}, \quad (18)$$

В літературі вхідний потенціал x (18) часто записують у вигляді лінійної комбінації вхідного та вихідного потенціалів попередньої ітерації:

$$x = \alpha x_2 + (1 - \alpha) y_2, \quad (19)$$

де коефіцієнт лінійної комбінації вхідного та вихідного потенціалів з попередньої ітерації (x_2, y_2) дорівнює

$$\alpha = \frac{x - y_2}{x_2 - y_2}, \quad (20)$$

Запис вхідного потенціалу у формі (19) дозволяє контролювати процес самоузгодження, а саме параметр α повинен бути в межах $0 < \alpha < 1$.

Далі були обчислені і проаналізовані повна та в окремих шарах густини станів для поверхонь, які закінчуються катіоном або аніоном:

$$N(E) = \sum_{\vec{k}_{||}, n} \int_{\Omega} |\Psi_{\vec{k}_{||}}(\vec{r})|^2 d\vec{r} \delta(E - E_n(\vec{k}_{||})), \quad (21)$$

де інтегрування ведеться по об'єму або окремого шара, або всієї елементарної комірки.

Автори розробили пакет програм АЕРР, який вміщує самоузгоджений розв'язок системи рівнянь методу псевдопотенціала з оригінальним ітератором; розрахунок поверхневих законів дисперсії в моделі шаруватої надгратки, розрахунок повної та в окремих шарах густини станів, 3D та контурних карт розподілу зарядової густини як повної, так і в окремих енергетичних зонах та в окремих точках зони Бріллюена та ін. Програма підходить для будь-якої кристалічної структури, довільного числа порожніх та заповнених атомних шарів, легко пристосовується для поверхонь з різними індексами. Власний пакет програм дозволяє авторам легко удосконалювати її, розширюючи сфери застосування.

3 Результати обчислювального експерименту та висновки

3.1 Зонна структура та густина електронних станів

В роботі розраховані двовірні зонні структури, повна і в окремих шарах густина станів та розподіл густини заряду валентних електронів (111) плівок ZnSe і GaAs.

Розрахунок проводився з використанням 1017 плоских хвиль, що відповідає $|G_{\max}|^2 \leq 4.8$ а.о.д. Збіжність досягалась на 20 – 24 ітерації, коли вхідний і вихідний потенціали відрізнялися на 0,1 – 0,15 eV.

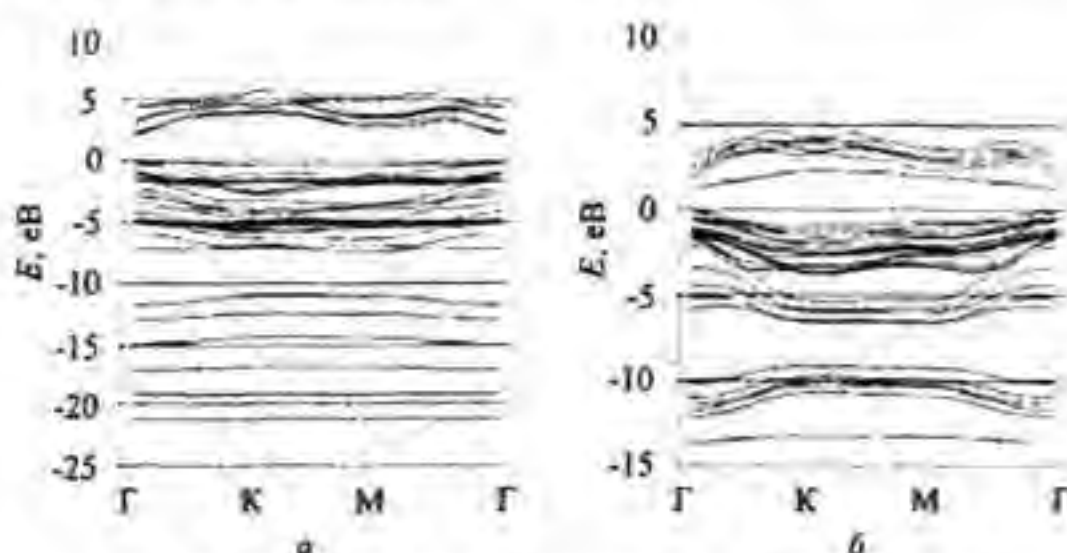


Рис. 1. Зонна структура 16-шарових (111) плівок ZnSe (а) та GaAs (б).

На рис. 1 представлена зонна структура 16-шарових (... 12 – 4 – 12 – 4 ...) (111) плівок селеніду цинку та арсеніду галію. Закони дисперсії обчислювались для поверхневих векторів $\vec{k}_{||}$ між точками $\Gamma(0,0)$, $M(1/2,0)$, $K(1/3,1/3)$ і $\Gamma(0,0)$ в двовірній зоні Бріллюена. Пряма ширина забороненої зони зменшилась порівняно з E_g в об'ємі кристалів. Одна з важливих причин цього полягає у зменшенні матричних елементів кристалічного псевдопотенціалу завдяки чергуванню заповнених і порожніх шарів у напрямку, перпендикулярному поверхні (111) кристала.

На рис. 2 – 5 наведені криві повної та пошарової густини станів плівок (111) селеніда цинку і арсеніда галію, побудовані з кроком 0.2648 eV для ZnSe та 0.2725 eV для GaAs. Енергетичний інтервал, в якому побудовані криві, вміщує всю валентну та заборонену зони, а також частину зони провідності.

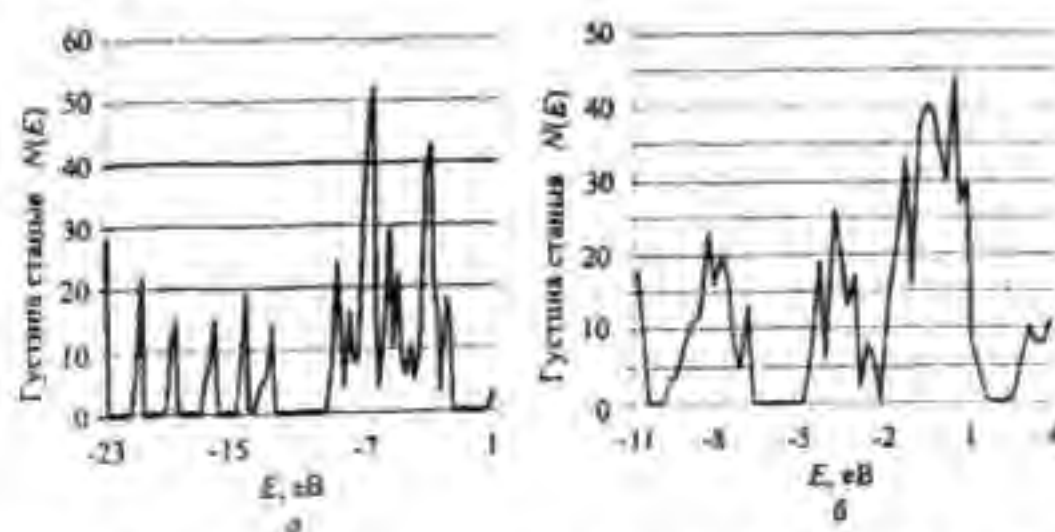


Рис. 2. Повна густина станів (111) плівок ZnSe (а) та GaAs (б).

На рис. 2(а) показана повна густина станів (111) плівки ZnSe, яка закінчується іоном Se.

На рис. 3а, 3б та 3в зображена густина станів центрального молекулярного шару такої 12-шарової плівки: шостий (Se 6) та сьомий (Zn 7) атомні шари. Цей центральний подвійний шар (Se 6 + Zn 7) відділений п'ятьма атомними шарами від обох поверхонь плівки і його густина станів наближається до об'ємної. Її можна розглядати як проекцію об'ємної густини станів на (111) площину. З рисунків видно, що в глибині валентної зони внесок іона Se в густину станів центрального шару на порядок перевищує внесок іона Zn, а на нижній границі фундаментальної забороненої зони внесок іона Zn в 7 – 8 разів більший за внесок іона Se.

На рис. 3г, 3д, 3е показана густина станів поверхневого шару Se 12, підповерхневого шару Zn 11 та поверхневого молекулярного шару Zn 11 + Se 12. З порівняння цих рисунків видно, що на відстані порядку 2 еВ від дна валентної зони з'явився великий пік густини станів (найбільше число станів – 20.6), який відповідає обірваному зв'язку на поверхневому іоні Se. Другий пік густини поверхневих станів розташувався під вершиною валентної зони на відстані близько 1 еВ (найбільше число станів 29.5). Тут внесок в густину станів поверхневого іона Se майже в 8 разів перевищує внесок підповерхневого іона Zn, який складає $\approx 13\%$.

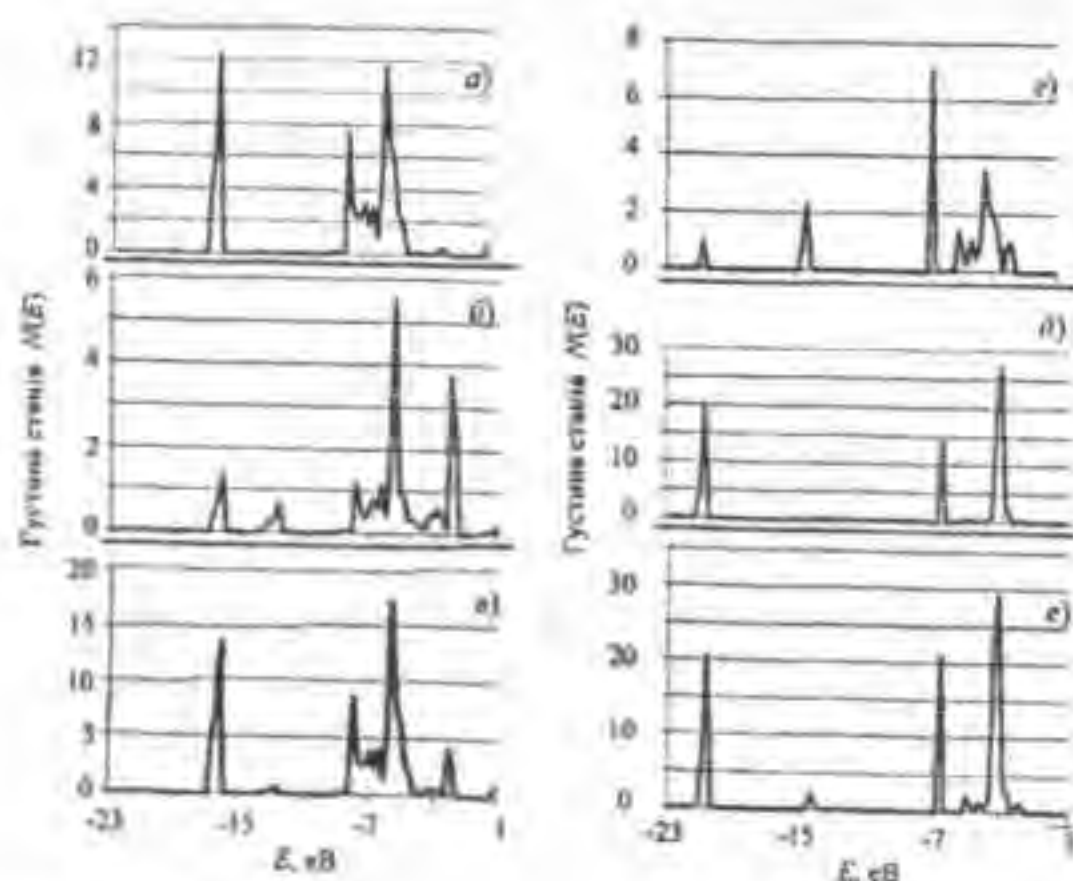


Рис. 3. Густина станів плівки (111) ZnSe, що закінчується іоном Se: а) – атомний шар Se 6; б) – атомний шар Zn 7; в) – центральний молекулярний шар Se 6 + Zn 7; г) – атомний шар Zn 11; д) – атомний шар Se 12; е) – поверхневий молекулярний шар Zn 11 + Se 12.

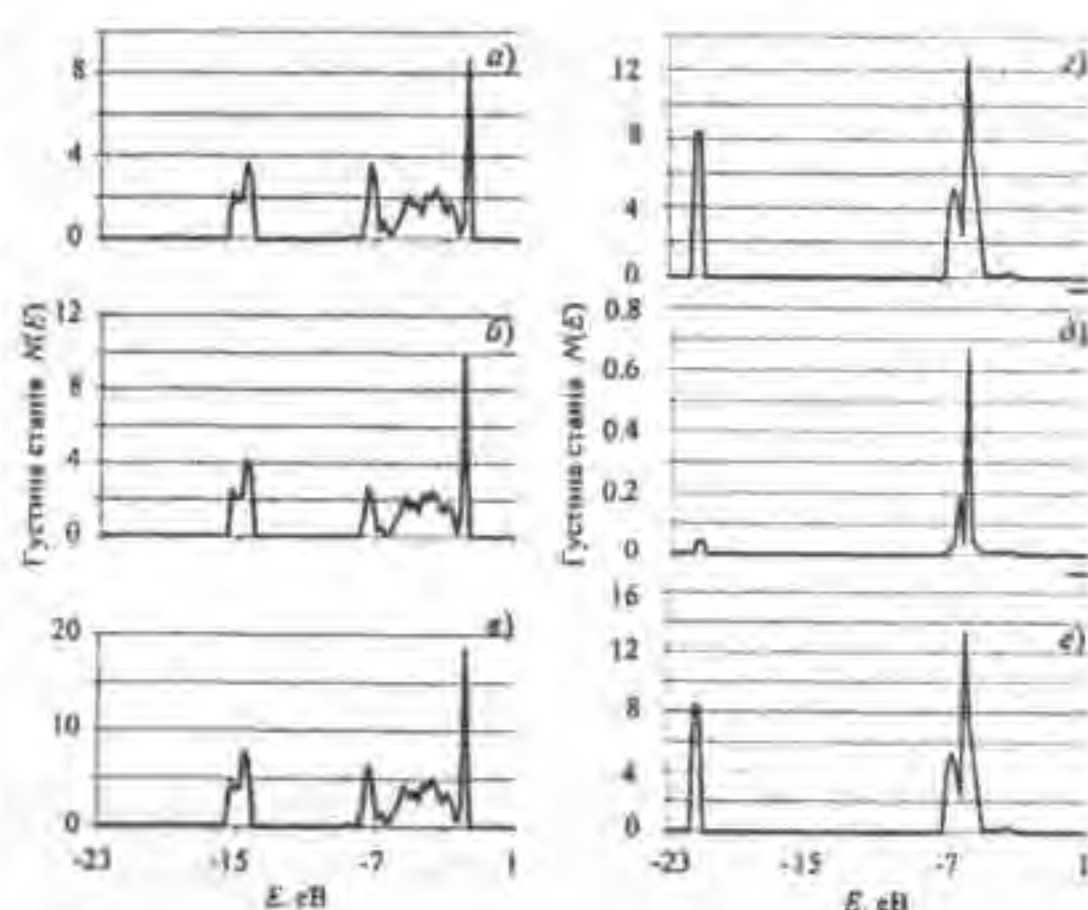


Рис. 4. Густина станів плівки (111) ZnSe, що закінчується іоном Zn: а) – атомний шар Zn 6; б) – атомний шар Se 7; в) – центральний молекулярний шар Zn 6 + Se 7; г) – атомний шар Se 11; д) – атомний шар Zn 12; е) – поверхневий молекулярний шар Se 11 + Zn 12.

На рис. 4а, 4б, 4в показана густина станів центрального молекулярного шару (Zn 6 + Se 7) 12-шарової плівки ZnSe, яка закінчується іоном Zn. В цьому випадку поверхневий рівень обірваного зв'язку з'являється над дном валентної зони на відстані ≈ 1 еВ (найбільше число станів 8.4). Другий поверхневий рівень розташований під вершиною валентної зони на відстані ≈ 2.6 еВ (максимальне число станів 13.4), причому внесок іона Zn, на якому обривається зв'язок, становить $\approx 5\%$. Крім того, мають місце слабкі резонанси в зоні провідності.

На рис. 4г, 4д, 4е показана густина станів поверхневого шару Zn 12, підповерхневого шару Se 11 і поверхневого молекулярного шару (Se 11 + Zn 12). З порівняння серії рисунків 3 – 4 видно, що величина та розташування поверхневих рівнів залежить від чергування атомів в поверхневому молекулярному шарі.

В GaAs на відміну від ZnSe внески іонів Ga і As в густину станів центрального молекулярного шару зрівняні за величиною – 42% і 58% для Ga і As відповідно, що пов'язано з меншою різницею в іонності атомів Ga і As порівняно з Zn і Se.

На рис. 2(б) показана повна густина станів (111) плівки GaAs, яка закінчується іоном Ga.

На рис. 5 (а, б, в) представлені густини станів центральних атомних та молекулярного шарів.

рів плівки (111) GaAs, що закінчується іоном Ga: Ga 6, As 7 і Ga 6 + As 7; а на рис. 5 (г, д, е) – поверхневих атомних та молекулярного шарів плівки (111) GaAs, що закінчується іоном Ga: As 11, Ga 12 і As 11 + Ga 12.

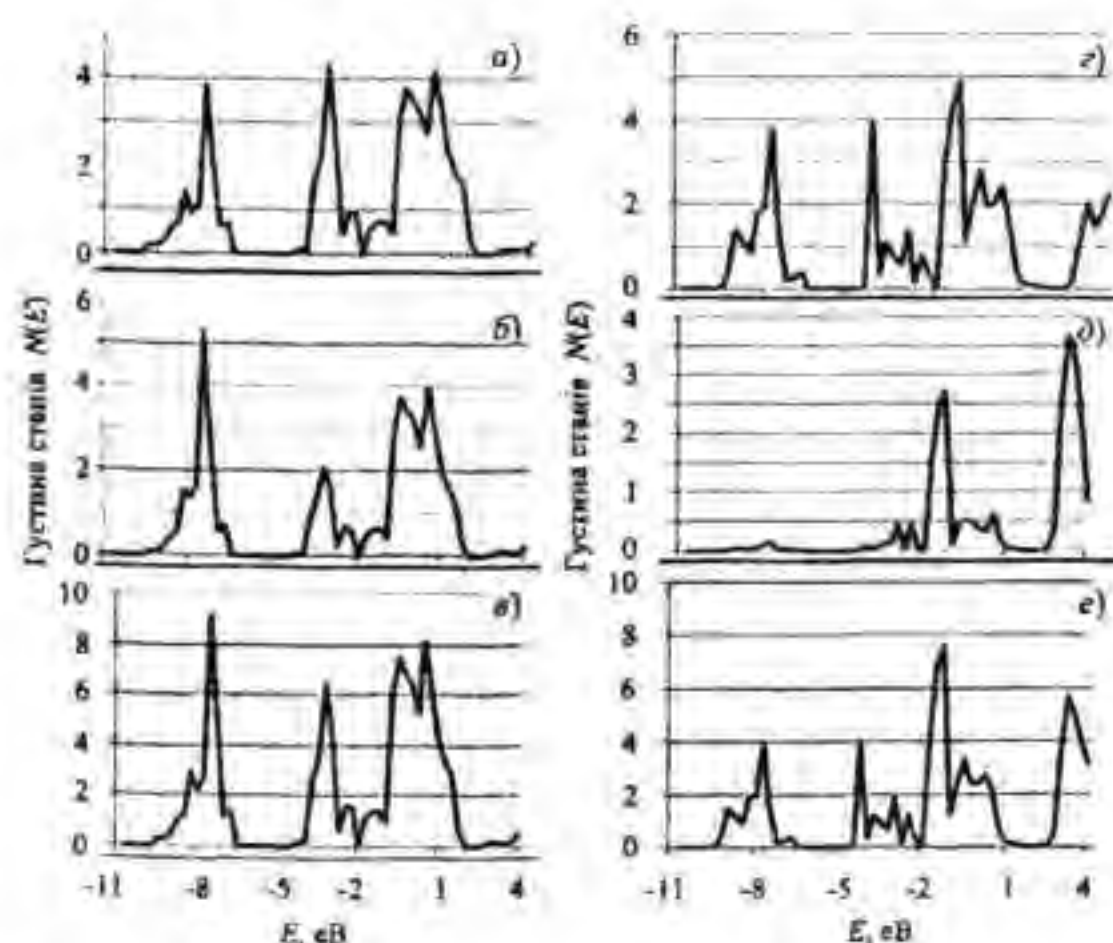


Рис. 5. Густина станів плівки (111) GaAs, що закінчується іоном Ga: а) – атомний шар Ga 6; б) – атомний шар As 7; в) – центральний молекулярний шар Ga 6 + As 7; г) – атомний шар As 11; д) – атомний шар Ga 12; е) – поверхневий молекулярний шар As 11 + Ga 12.

Видно, що в глибині валентної зони на відстані ≈ 3 еВ від її вершини з'являється поверхневий рівень обірваного зв'язку, створений в основному іоном As, а в забороненій зоні на відстані ≈ 2 еВ від вершини валентної зони спостерігається поверхневий рівень, створений в основному обірваним зв'язком іона Ga.

Порівняння досліджених властивостей густини електронних станів поверхні (111) з результатами роботи [6] для поверхні (110) в кристалах із структурою цинкової обманки показує суттєву різницю між ними. Це пояснюється перш за все тим, що на поверхні (110) знаходяться обидва типи атомів, а на поверхні (111) – катіон або аніон. Різниця має місце в зонній структурі, локальній густині станів та картах зарядової густини (див. нижче). У випадку поверхні (111) GaAs зона обірваного зв'язку знаходиться в забороненій зоні і перетинає рівень Фермі. Властивості поверхні (111) в кристалах типу сфалерита схожі із властивостями поверхні (111) кремнія.

Зі збільшенням ступеня іонності рівень

енергії поверхневого стану знижується і переходить у валентну зону.

3.2 Розподіл густини заряду валентних електронів

На рис. 6 (а, б, в, г) представлені контурні карти та 3D зображення розподілу зарядової густини валентних електронів в (111) плівці кристалу GaAs, яка починається іоном As (Ga), а закінчується іоном Ga (As), відповідно. Контурна карта представлена в площині $(1\bar{1}0)$, що перетинається з площиною (111) під прямим кутом.

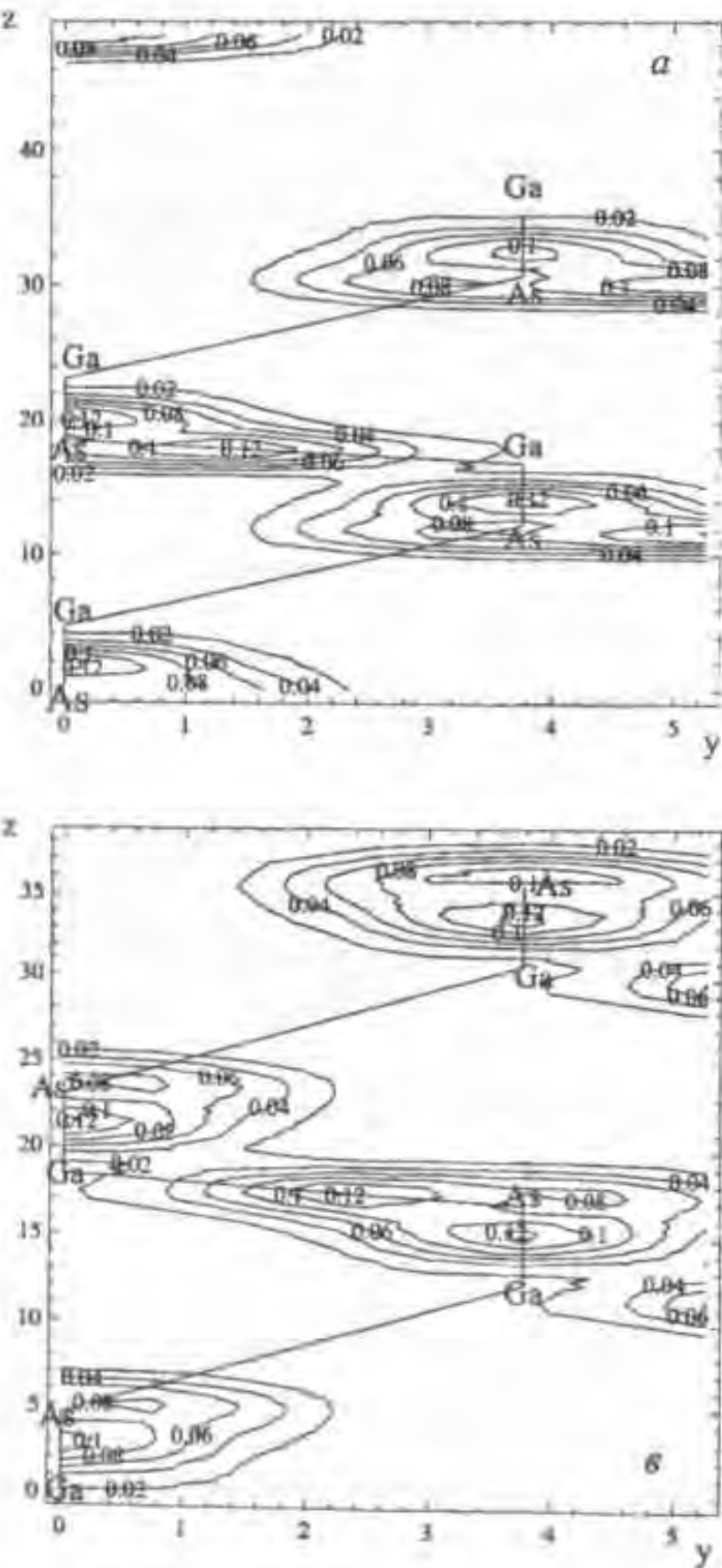
Тут і на наступних рисунках 8 атомів (4 атоми сорту А та 4 атоми сорту В) розташовані на площині $(1\bar{1}0)$, перпендикулярній до поверхні (111). Вісь z відповідає осі c великої подовженої елементарної комірки. По осі y відкладені y -координати точок в елементарній комірі. По вертикальній осі на 3D графіках відкладені величини зарядової густини. Густина заряду наведена в 10^{-3} ат.од. і нормована на число електронів в елементарній комірі (для скорочення будемо писати у.о.).

На вибраній площині $(1\bar{1}1)$ 4 атоми $(2A + 2B)$ мають координату $x = 0$ і 4 атоми $(2A + 2B)$ мають координату $x = 3.765$ а.о. у випадку GaAs та $x = 3.775$ а.о. у випадку ZnSe. Середня густина заряду поблизу іона Ga становить ≈ 0.013 у.о., а поблизу іона As – ≈ 0.076 у.о. Розрахунки показують, що зарядова густина верхнього поверхневого шару в (111) плівці кристалу GaAs мало відрізняється від зарядової густини центральних шарів.

На рис. 7 (а, б, в, г) представлені контурні карти та 3D зображення розподілу зарядової густини валентних електронів в (111) плівці кристалу ZnSe, яка починається іоном Se (Zn), а закінчується іоном Zn (Se), відповідно. Розрахунок показав, що середня густина заряду поблизу іона Zn становить ≈ 0.003 у.о., а поблизу іона Se ≈ 0.106 у.о. Максимальна зарядова густина $\approx (0.16 - 0.18)$ у.о. має місце в центральних шарах плівки на відстані $\approx (0.7 - 0.9)$ ат.од. від іона Se, навкруги якого концентрується значна частина валентного заряду. На рис. 7 (б, г) наочно видно, як густина валентного заряду несиметрично зменшується у напрямках до лівої і правої границь плівки. Тут великі горби належать іонам Se, а маленькі виступи – іонам Zn.

Тенденція до більш іонного зв'язку при переході від GaAs до ZnSe явно представлена на графіках густини заряду. Як і в об'ємі кристала, валентний заряд збільшується навкруги аніона і зменшується навкруги катіона, а на ковалентному зв'язку між іонами заряд скорочується. Збільшення іонності зв'язку впливає на

більш швидке загасання поверхневого збурення в ZnSe порівняно з GaAs. Справа в тому, що більша частина заряду локалізована на іоні Se, і тим самим вона визначає поведінку повної зарядової густини. Тому сильний потенціал Se помітно збурюється тільки на верхньому поверхневому рівні.



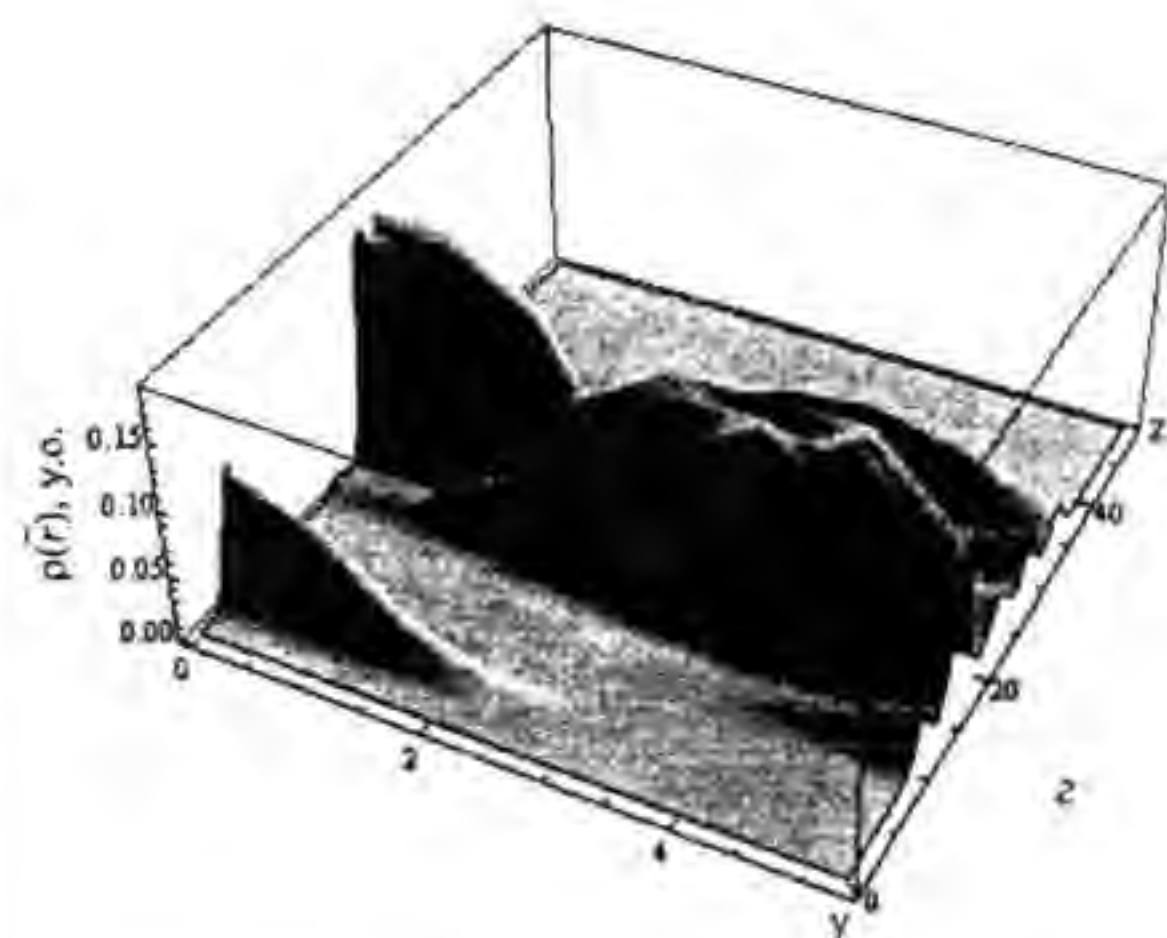
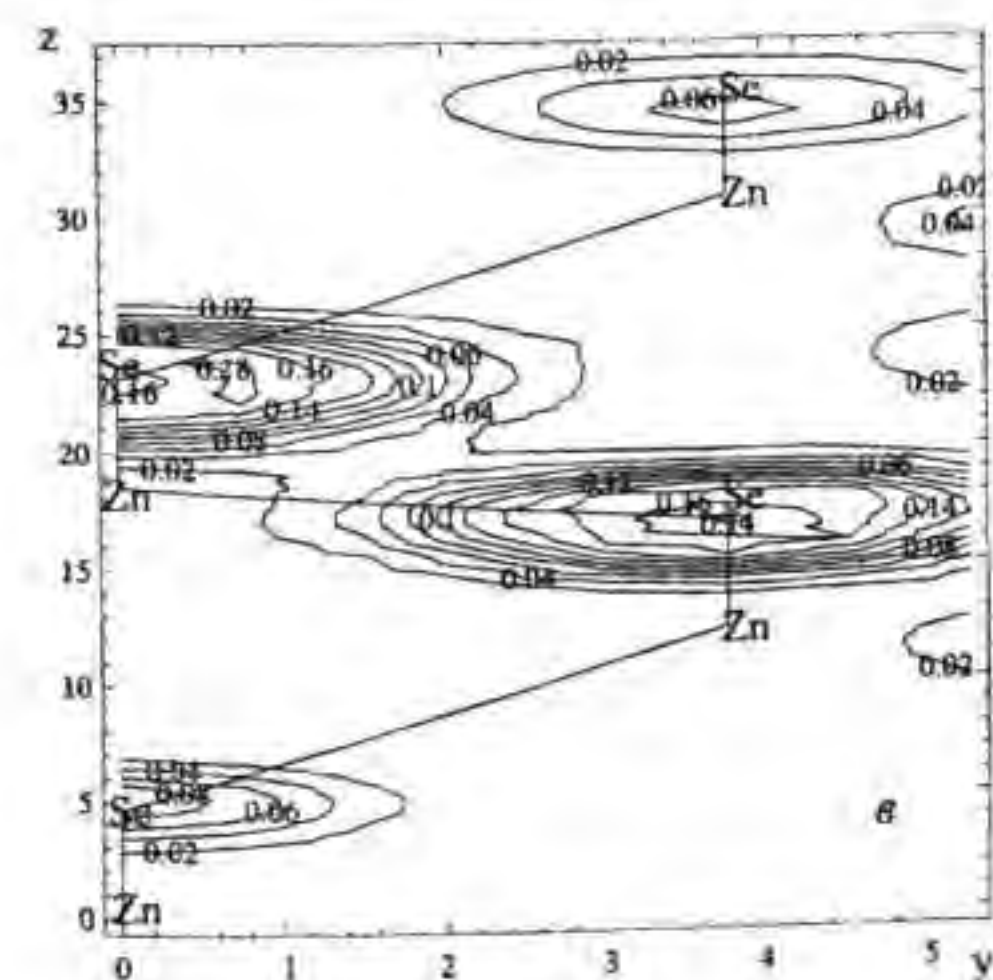
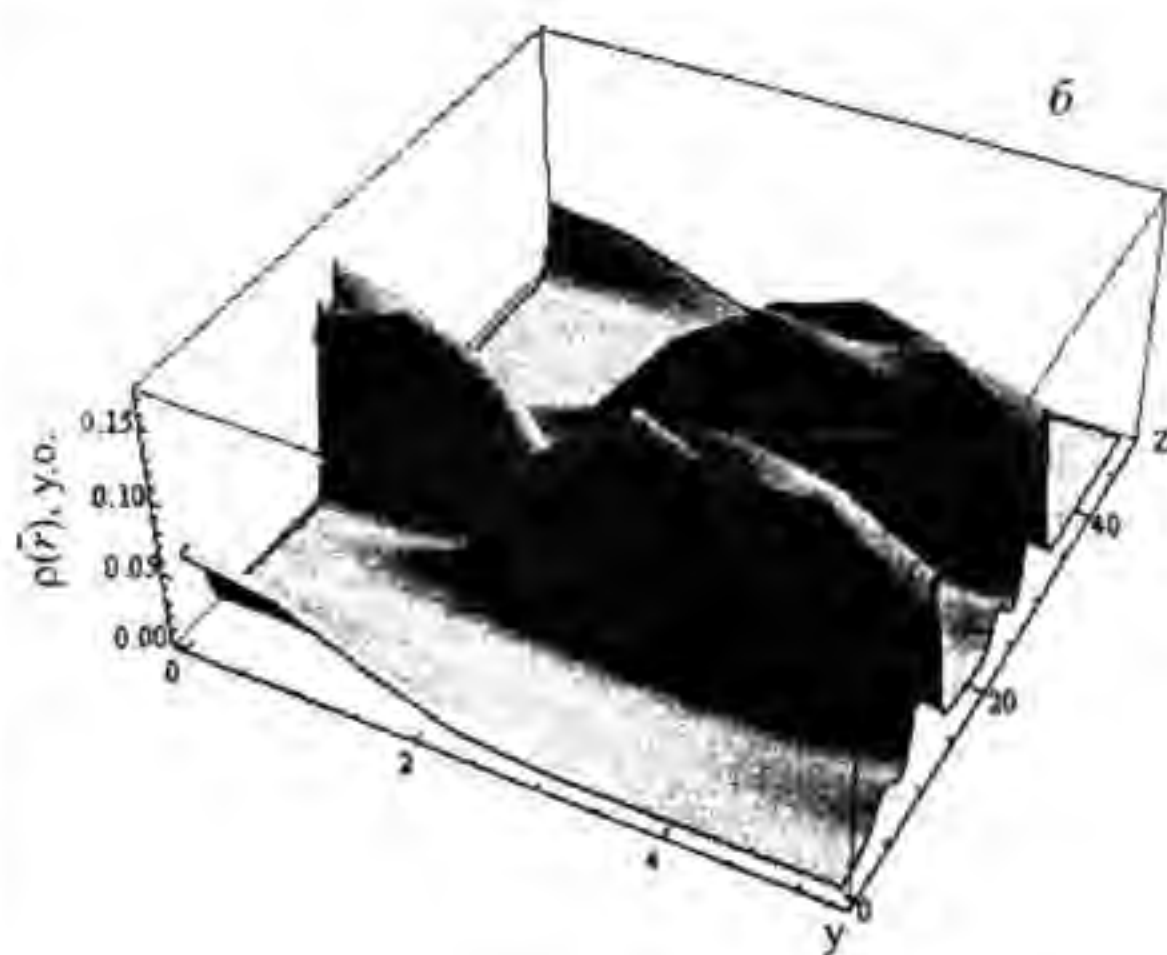
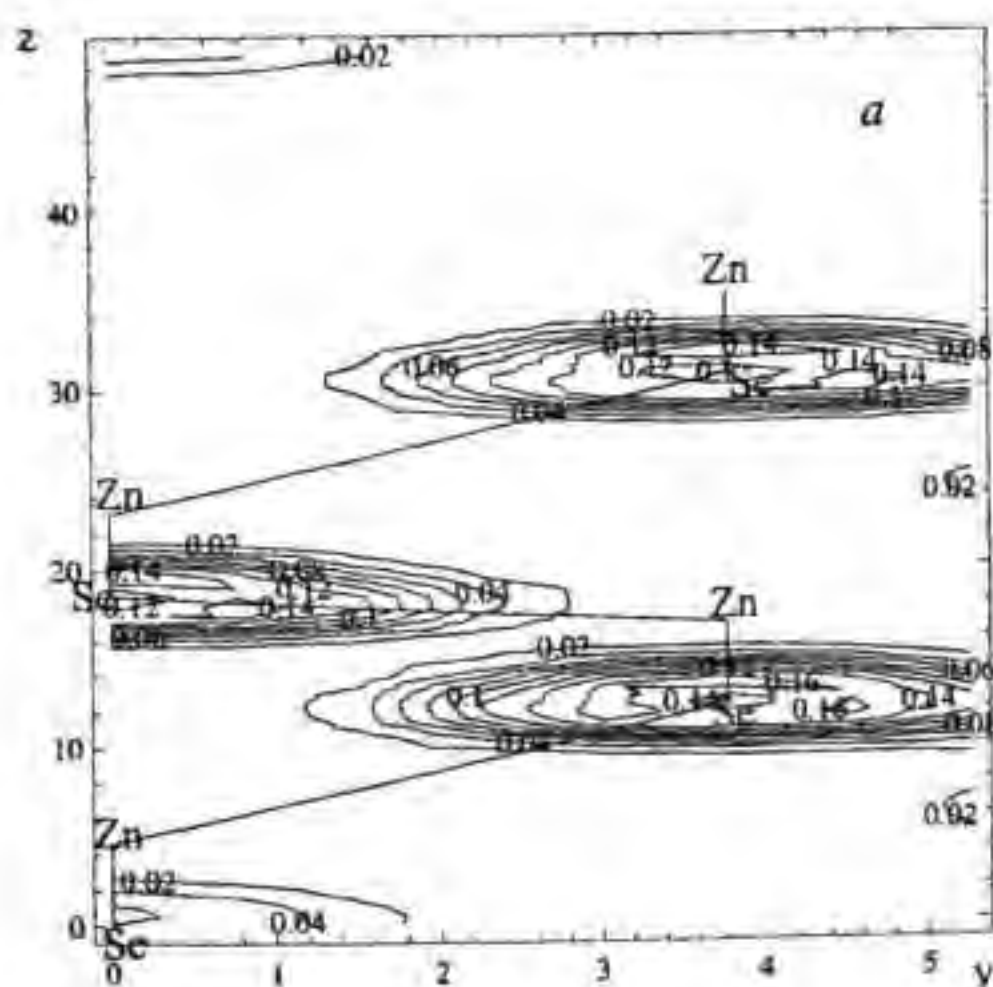


Рис. 7. Повна густина валентного заряду в (111) площі кристалу ZnSe, що закінчується іоном Zn (а – контурний графік, б – 3D зображення) та іоном Se (а – контурний графік, б – 3D зображення).

Відмітимо, що поверхня (111) не являється поверхнею розколу для кристалів типу цинкової обманки. Створення полярної поверхні потребує затрати більшої електростатичної енергії, необхідної для розділення двох напівпросторів з різною зарядженими границями. Проте таку поверхню одержали при бомбардуванні цих кристалів іонами Ar^+ з наступним відпалом в умовах надвисокого вакууму. На зразках арсеніду та фосфіду галію були проведені експерименти по вивченню поверхневого та об'ємного внеску в спектри фотоemisії електронів і дослідженню спектрів енергетичних втрат електронів [19], дифракції повільних електро-

нів [20] та ультрафіолетових фотоemisійних спектрів з розділенням по кутах [21]. Одержана в нашій роботі різниця енергій обірваних Ga- та As- зв'язків для ідеальної поверхні арсеніду галію корегує з різницею енергій відповідних піків в ультрафіолетовому фотоemisійному спектрі з кутовим розрізненням [22]. На жаль, поки для (111) поверхонь GaAs та ZnSe не знайдено нереконструйованих структур [23].

Список використаних джерел

1. Зенгула Э. Физика поверхности. – М.: Мир. – 1990. – Гл.4.

2. *Ciraci S., Batra I.P., Tiller W.A.* Electronic structure of the (111) surface of semiconductors // *Phys. Rev. B.* – 1975. – **12.** – P.5811-5823.
3. *Slater J.C., Koster G.F.* Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem // *Phys. Rev.* – 1954. – **94.** – P.1498-1524.
4. *Xiao Hu, Hong Yan, Masanori Kohyama, Fumio S. Ohuchi* Electronic structure of β -SiC surfaces // *J. Phys.: Condens.Matter.* – 1995. – **7.** – P.1069-1099.
5. *Sabisch M., Kruger P., Mazur A. et al* First-principles calculations of β -SiC(001) surfaces // *Phys. Rev. B.* – 1996. – **53.** – P.13121-13132.
6. *Chelcowsky J.R., Cohen M.L.* (110) surface states in A^2B^6 and A^3B^5 zinc-blende semiconductors // *Phys. Rev. B.* – 1976. – **13.** – P.826-834.
7. *Chelcowsky J.R., Cohen M.L.* Self-consistent pseudopotential calculation for the relaxed (110) surface of GaAs // *Phys. Rev. B.* – 1979. – **20.** – P.4150-4159.
8. *Кулькова С.Е., Еремеев С.В., Постников А.В. и др.* Атомная и электронная структура поверхности GaAs(001) // *Изв. вузов. Физика.* – 2006. – **10.** – С.44-52.
9. *Stekolnikov A.A., Furthmuller J., Bechstedt F.* Absolute surface energies of group-IV semiconductors: Dependence on orientation and reconstruction // *Phys. Rev. B.* – 2002. – **65.** – P.115318-1-115318-10.
10. *King P.D.C., Veal T.D., McConville C.F. et al.* Universality of electron accumulation at wurtzite c- and a-plane and zinc-blende InN surfaces // *Appl. Phys. Lett.* – 2007. – **91.** – P.092101-1-092101-3.
11. *Veal T.D., King P.D.C., and McConville C.F.* Nonparabolic coupled Poisson-Schrodinger solutions for quantized electron accumulation layers: Band bending, charge profile, and subbands at InN surfaces // *Phys. Rev. B.* – 2008. – **77.** – P.125305-1-125305-7.
12. *Marsili M., Pulci O., Bechstedt F., Del Sole R.* Tight-binding calculations of quasiparticle wave functions for C(111)2x1 // *Phys. Rev. B.* – 2008. – **78.** – P.205414-1-205414-6.
13. *Pulci O., Gori P., Garbuio V. et al.* Electronic and optical properties of group IV two-dimensional materials // *Phys. Stat. Sol.A* – 2010. – **207.** – P.291-299.
14. *Chady D.J., Cohen M.L.* Intrinsic (111) surface states of Ge, GaAs, and ZnSe // *Phys. Rev. B.* – 1975. – **11.** – P.732-737.
15. *Stankiewicz B., Jurczyk L., Kucharczyk R., Steslicka M.* Surface electronic structure of zinc-blende-type GaN (111) // *Czechoslovak J. of Physics.* – 1997. – **47.** – P.473-479.
16. *Schluter M., Chelcowsky J.R., Louie S.G., Cohen M.L.* Self-consistent pseudopotential calculations for Si (111) surfaces: Unreconstructed (1x1) and constructed (2x1) model structures // *Phys. Rev.B.* – 1975. – **12(10).** – P.4200-4214.
17. *Бехштедт Ф., Эндерлайн Р.* Поверхности и границы раздела полупроводников – М.: Мир. – 1990. – С.147.
18. *Abarenkov J.D., Heine V.B.* The model potential for positive ions // *Philos. Mag.* – 1965. – **12.** – P.529.
19. *Katnani A.D., Chadi D.J.* Photoemission and theoretical studies of GaAs(111) and $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ surfaces: Vacancy models // *Phys. Rev. B* – 1985. – **31.** – P.2554.
20. *Tong S.Y., Xu G., Hu W.Y., Puga M.W.* Vacancy buckling model for the (111) surface of III-V compound semiconductors // *J. Vac. Sci. Technol. B* – 1985. – **3.** – P.1076.
21. *Katnani A.D., Sang H.W., Chiaradia P., Bauer R.S.* Core-level photoemission study of MBE-grown GaAs(111) and (100) surfaces // *J. Vac. Sci. Technol. B* – 1985. – **3.** – P.608.
22. *Larsen P.K., van der Veen J.F.* Surface band structure of MBE-grown GaAs(001)-2x4 // *Phys. C: Solid State Phys.* – 1982. – **15.** – P.L431.
23. *Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотков А.В., Каталма М.* Введение в физику поверхности – М.: Наука. – 2006. – Гл. 10.

Надійшла до редакції 10.09.10

УДК 621.378.325

Захарченко І.В., к.ф.м.н., с.н.с.,
Кошеленко В.П., н.с.,
Крилов О.В., студ.,
Неділько С.Г., д.ф.м.н., с.н.с.

Експериментальне визначення внутрішніх втрат твердотільного імпульсного лазера

Проведено співставлення теоретичних розрахунків роботи [2] по оптимізації параметрів лазера при пасивній модуляції добротності резонатора з експериментальними результатами, отриманими в даній роботі, та експериментально визначена величина внутрішніх втрат лазера з резонатором на базі інтерферометра Саньяка з пасивною модуляцією добротності резонатора.

Ключові слова: лазер, інтерферометр Саньяка, внутрішні втрати.

*E-mail: o.v.krylov@gmail.com

На сучасний момент використання лазерних імпульсів наносекундного діапазону як у науково-дослідницькій, так і в технологічній галузях продовжує цікавити дослідників. Інтерес цей підсилюється в зв'язку з появою нових активних середовищ (АС) для лазерів на твердому тілі, що дає змогу перебудовувати частоту генерації в широких межах, а також використовувати імпульси наносекундного діапазону для оптичного запису та обробки інформації [3, 5, 6]. У цьому зв'язку особливої актуальності набуває задача розробки способів надійної оцінки оптимальних умов генерації лазера з модульованою добротністю резонатора шляхом вибору параметрів лазерного випромінювача та узгодження їх із спектроскопічними характеристиками як активних середовищ, так і фільтрів, що просвітлюються.

Така задача розглядалась щодо лазерів з активною (АМ - лазер) та пасивною (ПМ - лазер) модуляцією добротності резонатора у роботах [1, 2, 4].

Оскільки в роботах [1, 2] розрахунки проводяться в нормованих величинах і в тих же величинах побудовані відповідні номограми для визначення енергетичних параметрів імпульсів випромінювання лазера з модульованою добротністю резонатора, то має сенс дати визначення цих величин. Нормовані втрати $\tilde{\gamma}_1$ на

I.Zakharchenko, PhD, Sen. Sci. Res.,
V.Koshelenko, Sci. Res.,
O. Krylov, stud.,
S. Nedilko, Dr. Sci., Sen. Sci. Res.

Experimental detection of internal losses of solid-state pulse laser

Compared theoretical calculations to optimize parameters of laser passive Q switching of the resonator [2] with the experimental results obtained in this work. Experimentally determined value of internal losses of laser with resonator based on Sagnac interferometer with passive Q switching resonator.

Key Words: laser, Sagnac interferometer, internal losses.

вихідному дзеркалі лазера вводяться співвідношенням $\tilde{\gamma}_1 = \gamma_1 / 2\gamma_0$, де γ_0 – доля внутрішніх втрат випромінювання за час одного проходу (від одного дзеркала до другого) резонатора, при цьому $\gamma_1 = -\ln(1 - T_1)$ – логарифмічні втрати випромінювання (корисні) на вихідному дзеркалі за один прохід резонатора, де T_1 – пропускання вихідного дзеркала. Нормована енергія випромінювання $\tilde{E}$ вводиться як $\tilde{E} = \beta^{-1} E / \gamma_0$, нормована пікова потужність – $\tilde{P}_m = \beta^{-1} P_m / \gamma_0^2$, а нормована енергетична тривалість лазерного імпульсу вводиться як $\Delta\tilde{\tau} = \tilde{E} / \tilde{P}_m$. Параметр β для чотирьохрівневого лазера дорівнює одиниці, а для трьохрівневого – 2. Величина $\tilde{\alpha}_0 = \alpha_0 / \gamma_0$, де α_0 – початковий коефіцієнт підсилення активного середовища при непросвітленому пасивному модуляторі (ПМ). Величина χ_{0M} початкових втрат пасивного лазерного модулятора вводиться як $(1 - T_{0M})$, де T_{0M} – початкове пропускання модулятора.

В [1] одержані аналітичні вирази та універсальні номограми для розрахунку пропускання вихідних дзеркал резонатора АМ – лазера в залежності від величин початкової інверсної заселеності та внутрішніх втрат лазера

γ_0 , що забезпечує максимальну енергію, максимальну пікову потужність та мінімальну тривалість гігантського імпульсу випромінювання. Аналогічна задача щодо лазерів з пасивною модуляцією добротності резонатора розглядалася в [2]. Актуальність її зумовлена необхідністю оцінки ефективності використання конкретного пасивного модулятора (ПМ) у різних ділянках спектрального діапазону з області перебудови лазера. В [2] одержані співвідношення в параметричній формі та запропоновані зручні для практичного використання аналітичні апроксимації цих співвідношень, що встановлюють зв'язок між початковим коефіцієнтом поглинання ПМ та такою величиною γ_1 корисних втрат випромінювання крізь вихідне дзеркало резонатора, що забезпечує максимальні енергію і пікову потужність та мінімальну тривалість вихідного імпульсу випромінювання. В загальному випадку γ_{1E} для оптимальної енергії, γ_{1P} для оптимальної пікової потужності і γ_{1t} для мінімальної енергетичної тривалості гігантського імпульсу - різні [1, 2]. У розрахунок відповідної величини γ_1 визначальним чином входить величина внутрішніх втрат лазера γ_0 , яка включає в себе і нерезонансну частину коефіцієнта поглинання ПМ (залишкове поглинання ПМ), що зумовлена наявністю таких електронних станів, заселеність яких слабо

змінюється під дією лазерного випромінювання. Визначення внутрішніх втрат лазера γ_0 дає змогу розрахувати оптимальний коефіцієнт відбивання (R_{1R}, R_{1P}, R_{1t}) вихідного дзеркала резонатора для одержання максимальних енергій, пікової потужності або мінімальної тривалості гігантського імпульсу випромінювання [1, 2].

Скористаємося співвідношенням отриманого в роботах [1] для АМ-лазера та [2] для ПМ-лазера з деякими перепозначеннями, які пояснюються нижче.

Для ПМ - лазера логарифмічні внутрішні втрати γ_0 згідно з формулами (12), (13) роботи [2] пов'язані з оптимальним по енергії пропусканням $T_{1EP} = 1 - R_{1EP}$ вихідного дзеркала співвідношенням

$$\frac{\gamma_{1EP}}{2\gamma_0} \cong 1.24 + 0.3 \frac{\chi_{0M}}{\gamma_0} - \exp\left(-\frac{\chi_{0M}}{2\gamma_0}\right) \quad (1)$$

де $\gamma_{1EP} = -\ln(1 - T_{1EP}) = -\ln R_{1EP}$; $\chi_{0M} = 1 - T_{0M}$, T_{1EP} - пропускання вихідного дзеркала ПМ - лазера, T_{0M} - початкове пропускання ПМ.

Розв'язуючи рівняння (1) відносно γ_0 з урахуванням малої величини останнього доданку в правій частині рівняння (1) отримаємо методом послідовних наближень

$$\gamma_0 = \frac{-0.5 \ln R_{1EP} - 0.3 \cdot (1 - T_{0M})}{1.24} \left\{ 1 + \exp\left[\frac{1.24 \cdot (1 - T_{0M})}{\ln R_{1EP} + 0.6 \cdot (1 - T_{0M})} \right] \right\} \quad (2)$$

Оптична схема установки для вимірювання внутрішніх втрат лазера представлена на рис. 1. На цьому рисунку інтерферометр Саньяка схематично замінений еквівалентним "глухим" дзеркалом М1.

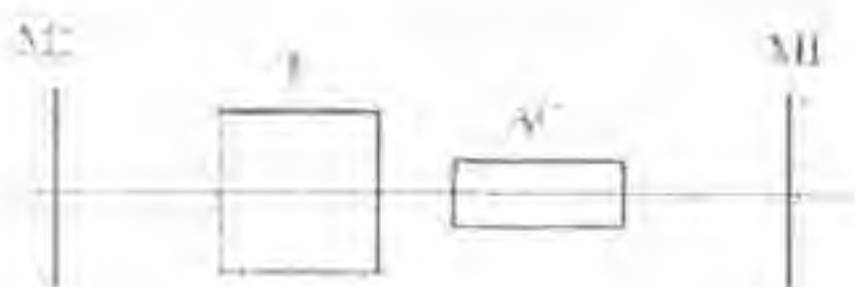


Рис. 1. Оптична схема резонатора лазера, де М2 – 100% відбиваюче дзеркало лазерного резонатора, F – модулятор (активний, або пасивний), AC – активне середовище, М1 – вихідне дзеркало резонатора.

Для лазера з пасивною модуляцією добротності алгоритм визначення величини γ_0 внутрішніх втрат лазера є наступним.

Вимірюють залежність енергії лазерного імпульсу від коефіцієнта відбивання R_{1EP} вихідного дзеркала. Результати вимірювання цієї величини для конкретного лазерного резонатора на базі інтерферометра Саньяка показані на рис. 2. Параметри та склад лазера наступні: Довжина кільця інтерферометра Саньяка – 900 мм; відстань між світлоподільним та вихідним дзеркалами – 140 мм; активне середовище – Алюмо-ітрієвий гранат ГП 6.3 x 65 мм; квантрон – К-104Г; пасивний лазерний модулятор на базі полімерної плівки з початковим пропусканням $T_0 = 63\%$ на частоті генерації.

По цьому алгоритму експериментально визначається величина відбивання вихідного

дзеркала R_{IE} , що оптимізує вихідну енергію лазерного імпульсу при пасивній модуляції добротності і середню потужність $P_{СП} = E/\Delta t$.

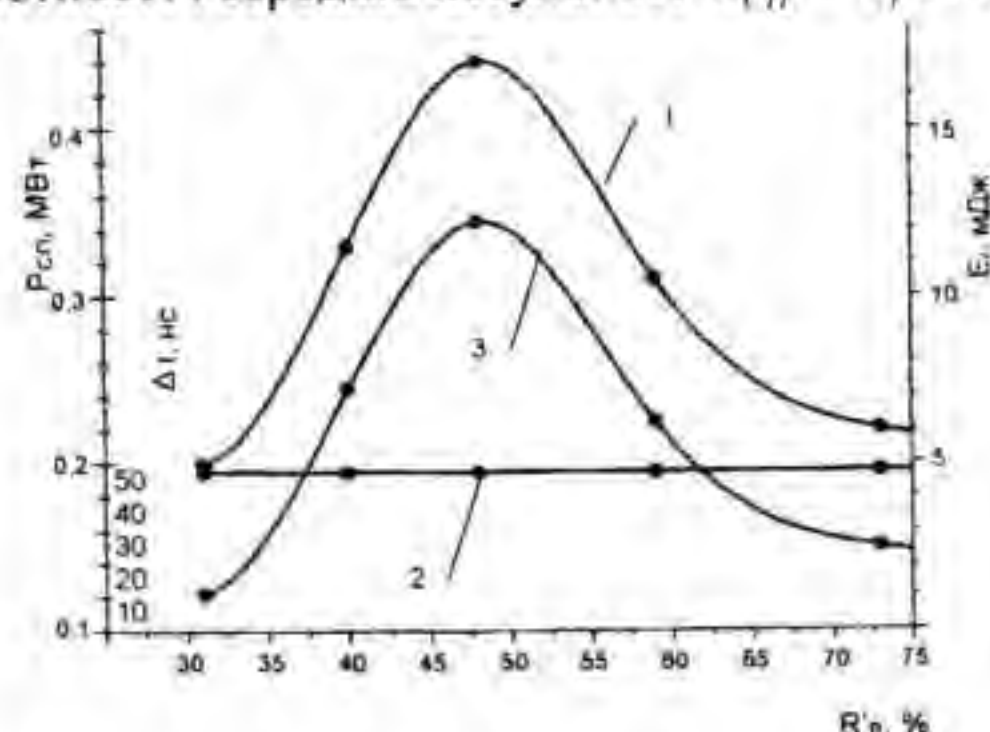


Рис. 2 Залежність енергії (1), півширини (2) та середньої потужності (3) (експериментальні данні наведено точками) лазера з пасивною модуляцією добротності резонатора на базі інтерферометра Саньяка від коефіцієнта відбивання вихідного дзеркала $R_{IEП}$ з початковим коефіцієнтом пропускання ПМ $T_{0М} = 63\%$.

Як видно з рис. 2, існує вихідне дзеркало з коефіцієнтом відбивання $R_{IEП} \sim 46 \div 48\%$, яке екстремалізує енергію, що підтверджує теоретичні розрахунки роботи [2].

З аналізу залежності енергії від коефіцієнта відбивання вихідного дзеркала ПМ – лазера визначається оптимальний, для нашого випадку, коефіцієнт відбивання $R_{IEП} \approx 48\%$.

Тепер величину γ_0 внутрішніх втрат лазера розраховують за формулою (2).

У нашому випадку величина γ_0 виявилася рівною 0,09, що відповідає втратам – 9%.

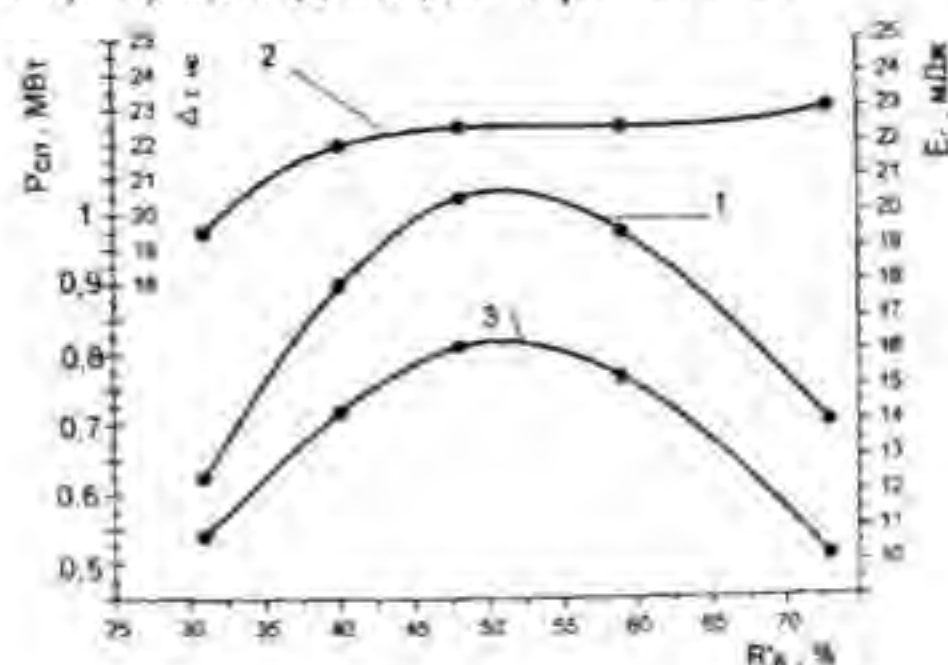


Рис. 3. Залежність енергії(1), півширини (2) та середньої потужності (3) (експериментальні данні наведено точками) лазера з пасивною модуляцією добротності резонатора на базі інтерферометра Саньяка від коефіцієнта відбивання вихідного дзеркала $R_{IEП}$ з початковим коефіцієнтом пропускання ПЛЗ $T_0 = 41\%$.

На рис. 3 показано результати вимірювань енергетичних характеристик моноімпульсу генерації у випадку, коли початкове пропускання пасивного лазерного затвору складає величину $T_{0М} = 41\%$. Як видно з рисунка величина коефіцієнта відбивання вихідного дзеркала, що оптимізує величину енергії є $R_{IEП} = 46\%$. Тобто, як і у випадку з $T_{0М} = 63\%$, величина енергії лазерного імпульсу оптимізується приблизно при такому ж коефіцієнті відбивання вихідного дзеркала $R_{IEП}$. Величина внутрішніх втрат лазера γ_0 у цьому випадку дорівнює 0,19, що дає величину внутрішніх втрат ПМ – лазера – 19%.

Для ПМ-лазера [2], можливо експериментально визначити γ_0 , визначаючи відношення k оптимальних пікових потужностей $P'_{СП}$ та $P_{СП}$ з внесеними в резонатор малими контрольованими втратами γ' та без них відповідно.

$$\frac{P'_{СП}}{P_{СП}} = k = \frac{\ln y'_{СП}}{\ln y_{СП}}, \quad (3)$$

де $y'_{СП}, y_{СП}$ – величини, обернені перевищенню коефіцієнта підсилення α_0 активного середовища (АС) над повними втратами резонатора без додатково внесеними втратами γ' і з ними відповідно [2].

При цьому оптимальні втрати на вихідному дзеркалі $\gamma_{СП} = -\ln R_{СП}$ згідно з [2]

$$\frac{\gamma_{СП}}{2} = \frac{\gamma'_{СП}}{2} = \frac{\sqrt{6}}{6} \chi_{0М}, \quad (4)$$

$$R_{СП} = \exp\left(-\frac{\sqrt{6}}{3} \chi_{0М}\right). \quad (5)$$

Тобто оптимальні по піковій потужності дзеркала однакові для резонатора з внесенням втратами і без них.

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \gamma_0 + \frac{\gamma_{СП}}{2} + \chi_{0М} \neq \alpha'_0 = \\ &= \gamma_0 + \gamma' + \frac{\gamma_{СП}}{2} + \chi_{0М}. \end{aligned} \quad (6)$$

Тоді з урахуванням (3):

$$y'_{\text{рп}} = \frac{\frac{\sqrt{6}}{6} \chi_{0M} + \gamma_0 + \gamma'}{\frac{\sqrt{6}}{6} \chi_{0M} + \gamma_0 + \chi_{0M} + \gamma'};$$

$$y_{\text{рп}} = \frac{\frac{\sqrt{6}}{6} \chi_{0M} + \gamma_0}{\frac{\sqrt{6}}{6} \chi_{0M} + \gamma_0 + \chi_{0M}}.$$

З (3) отримуємо:

$$\gamma_0 \equiv \left\{ \frac{c^k - c(1+c)^k + c^{k+1} - \frac{\gamma'}{\chi_{0M}} [(1+c)^k - c^k]}{\frac{\gamma'}{\chi_{0M}} [k(1+c)^{k-1} - kc^{k-1}] + c(1+c)^{k-1}k - c^k k + (1+c)^k - c^k} + 1 \right\} \chi_{0M} \quad (8)$$

$$\text{де } c = \frac{6 + \sqrt{6}}{6}.$$

Якщо контрольовані втрати γ' забезпечують відбиванням від внесеної в резонатор перед вихідним дзеркалом плоскопаралельної пластини з коефіцієнтом відбивання R' , то $\gamma' = -\ln(1 - R')$.

Слід підкреслити, що величина внутрішніх втрат лазера γ_0 визначається як величиною нерезонансних втрат на оптичних елементах резонатора, що включає дифракційні втрати на апертурах цих елементів, так і залишкові втрати в пасивному лазерному модуляторі, що просвітлюється. Крім того, в величину γ_0 входять втрати на світлоподільному дзеркалі, які пов'язані з неідеальністю деструктивної інтерференції світлових пучків на ньому. З експериментально визначеної величини γ_0 при різних $T_{0\text{П}}$ видно, що ПМ з меншим початковим пропусканням має більші залишкові втрати.

Ще один факт, що впливає з рис. 3. Спостерігається помітне скорочення з ~ 24 до ~ 19 нс півширини імпульсу генерації при зменшенні коефіцієнта відбивання $R_{\text{вп}}$ вихідного дзеркала до величини 31%. Це дає змогу керувати величиною півширини лазерного імпульсу зміною величини $R_{\text{вп}}$. Цей експериментальний факт теж підтверджує висновки роботи [2].

Таким чином, проведено співставлення теоретичних розрахунків роботи [2] по оптимізації параметрів лазера при пасивній

$$\frac{z_n^k}{(1+z_n)^k} - z_n = a_n, \quad (7)$$

$$\text{де } z_n = \frac{\sqrt{6} + 6}{6} (1+x); \quad x = \frac{\sqrt{6}}{1+\sqrt{6}} \left(\frac{\gamma_0}{\chi_{0M}} - 1 \right);$$

$$a_n = \frac{\gamma'}{\chi_{0M}}.$$

Зважаючи на те, що $x \ll 1$ з (7) отримаємо:

модуляції добротності резонатора з експериментальними результатами, отриманими в даній роботі. Експериментально визначена величина γ_0 внутрішніх втрат лазера з резонатором на базі інтерферометра Саньяка та пасивною модуляцією добротності резонатора.

1. Белый М.У., Захарченко И.В., Кошелев В.П., Охрименко Б.А. Влияние параметров резонатора на энергетические характеристики импульса лазера с активной модуляцией добротности. // Квантовая электроника, 1986. вып.31.
2. Білий М.У., Захарченко І.В., Кошелев В.П., Охрименко Б.А. Оптимізація енергетичних параметрів лазера при пасивній модуляції добротності резонатора. // Укр.фіз.журн., 2001, т.46, №11.
3. Природа швидкої фоторефрактивної нелінійності в кристалі CdTe:Fe/А.О.Борщ, М.С.Бродин, В.І.Волков та інші. // Укр.фіз.журн., 1999, т.44, №1-2.
4. Ханін Я.И. Динамика квантовых генераторов. // М., 1975.
5. Vergara I., Garsia Sole J., Hoyos H.A., Calderon T. Fluorescence properties of Cr³⁺ in natural phosphorite crystals. // Solid State Communication, 1990. - V.76, №3.
6. Walling J.C., Peterson O.G., Jenssen H.P., et al. // IEEE, J. Quantum Electronics, 1980. - V. QE-16.

Надійшла до редколегії 11.10.2010

УДК 537.32

Копань В.С., д.ф.-м. н., проф.
Хуторянська Н.В. пров. інж.
Копань Ю.В., пров. інж.

Термоелектричний адсорбційний ефект в металевих і вуглецевих порошках

Виміряна різниця між термо-е.р.с. E_0 сухого порошку (Cu, Fe, Cr, графіту) і термо-е.р.с. E_1 порошку після адсорбції етанолу $E_a = E_1 - E_0$.

Термоелектричний адсорбційний ефект виникає завдяки тунелюванню електронів (дірок) від гарячої частинки порошку до холодної через щілину між ними.

Ключові слова: термоелектрорушійна сила, адсорбція алкоголю, металевий порошок.

E-mail: @pulsary.com.ua

Вступ

Адсорбція газів і рідин пористими матеріалами і плівками спричинює зміну їх багатьох властивостей, зокрема, електроопору. Це явище використовують поряд з іншими в аналізаторах газів і рідин [4]. Насипні порошки для цих цілей малопридатні, бо їх електроопір змінюється в результаті вібрацій, наприклад, під дією звуку. Тому використовують спечені порошки або композиції [5]. Але в них питома адсорбуюча поверхня менша, ніж в насипних порошках. Крім того, збільшений період циклу адсорбція – десорбція, що ускладнює швидкісний аналіз середовища на домішки. Термо-е.р.с. менш чутлива до вібрацій у порівнянні з електроопором, бо вібрації діють одночасно на обидві близько розташовані вітки термопар, відбувається взаємна компенсація коливань термострумів, якщо вітки виготовлені з однакових порошків.

В [6-8] вперше було повідомлено про термоелектричний адсорбційний ефект, що полягає в зміні термо-е.р.с. вуглецевих і деяких металевих порошків при адсорбції ними молекул неелектропровідних речовин.

Мета роботи – експериментальне дослідження термоелектричного адсорбційного ефекту (ТЕАЕ) в порошках міді, заліза, хрому, спектрально-чистого графіту та терморозширеного графіту (ТРГ).

V.S. Kopan', Dr of Sci, Prof,
N.V. Hutoryanska, eng.
U.V. Kopan', eng.

Thermoelectric adsorption effect in metal's and carbon powders.

The difference between the thermoelectric power (TEP) E_0 of the dry powder (Cu, Fe, Cr, graphite) and of TEP E_1 of this powder after adsorption of alcohol $E_a = E_1 - E_0$ was measured.

The thermoelectric adsorption effect E_a is owing to electron's tunneling from a hot particle of the powder to a cold through chinks between particle..

Key Words: Thermoelectric powder, adsorption of alcohol, metal powder.

Методика експерименту

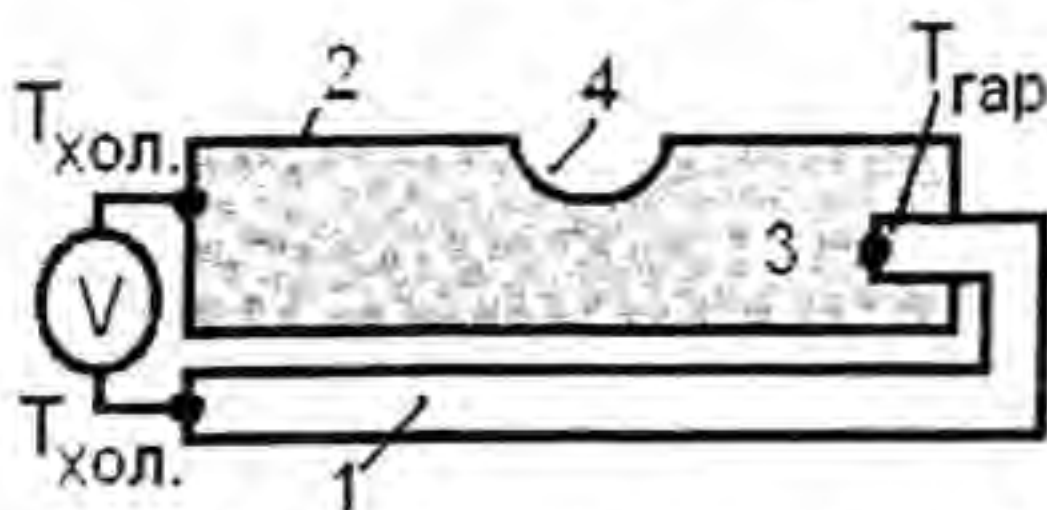


Рис. 1. Схема термопар, робоча вітка якої виготовлена з насипного порошку 3.

Термопара складається з еталонної вітки 1 (рис.1) монолітного матеріалу та робочої вітки 2-4 з порошку 3 цього ж матеріалу. Робоча вітка – це пластмасова трубка 2 з отвором 4 в боковій стінці посередині довжини, наповнена насипним порошком 3 з досліджуваного матеріалу (графіт, ТРГ, мідь, залізо, хром тощо). Температура гарячого «спаю» становила $T_{\text{гар}} = 62 \pm 0,050^\circ\text{C}$, а кінців термопар $T_{\text{хол}} = 20 \pm 0,10^\circ\text{C}$. Оскільки термопара має малий електроопір (0,001-10 Ом), то вона закорочує вхідні клемами потенціометру V. Тому для вимірювання термо-е.р.с. з похибкою 10^{-8}В використовували потенціометр, чутливим елементом якого є гальванометр з вхідним опором 20 Ом. Потенціометром можна вимірювати сигнали термопар, величиною до 10^{-16}Вт . В першу чергу вимірювали початкове значення термо-е.р.с. E_0 . Потім в отвір 4 робочої

вітки додавали вибрану рідину. Вимірювали термо-е.р.с. E_a , що змінювалась з часом внаслідок адсорбції - десорбції рідини порошком.

Експериментальні результати та їх обговорення

Результати вимірів наведені на рис. 2-6. По вертикалі відкладено величину $E_a = E_t - E_0$, де E_0 - початкове значення термо-е.р.с., а E_t - термо-е.р.с. термодари, що змінюється з часом t після адсорбції чергової порції рідини. Початок адсорбції в циклі позначено великою світлою точкою.

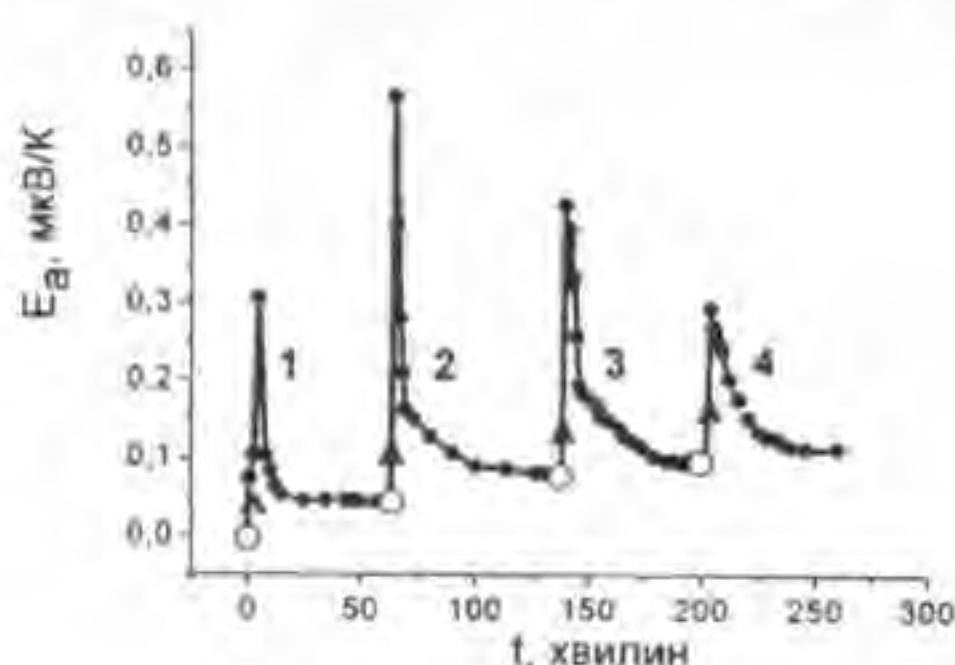


Рис.2. Залежність від часу t термо-е.р.с. E_a , обумовленої адсорбцією мідним порошком етанолу у концентрації 1,5 об.%; 3; 3; 3 (криві 1, 2, 3, 4 відповідно).

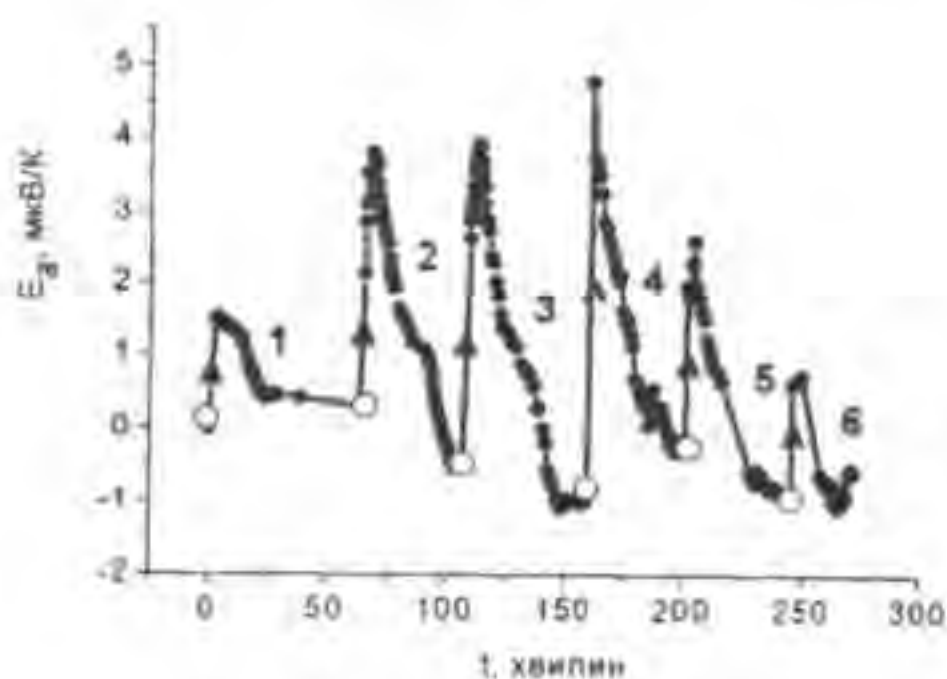


Рис.3. Залежність від часу t термо-е.р.с. E_a , обумовленої адсорбцією залізним порошком етанолу у концентрації 1,5 об.%, 3; 3; 3; 3; 1,5 (криві 1, 2, 3, 4, 5, 6 відповідно).

Зміну термо-е.р.с. робочої вітки термодари (рис.1) при адсорбції порошком етанолу можна

пояснити, на нашу думку, наступним чином. Від гарячої частинки порошку (рис.7) до сусідньої холодної носії електричного заряду (електрони, дірки) дифундують через зазор між частинками шириною ω . Він являє собою певний потенціальний бар'єр висотою U_2 . Тому носії долають його по механізму тунелювання. Якщо на потенціальний бар'єр налітає потік носіїв I_1 , то на виході з нього маємо потік I_3 . Задача на тунелювання розв'язана в квантовій механіці [3]. Якщо хвилі носіїв в гарячій частинці, зазорі і холодній ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 , кінетичні енергії E_1 і E_3 , а потенціали U_1 , U_2 , U_3 , відповідно, то, розв'язавши стаціонарне рівняння Шредінгера, записаного для одномірного випадку у вигляді

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right)\psi = E\psi, \quad (1)$$

одержимо, згідно [3-6], що

$$\frac{I_3}{I_1} = 16 \frac{E_1}{U_2} \exp(-2\gamma\omega), \quad (2)$$

$$\text{де } \gamma = \frac{1}{\hbar} (2mU_2)^{1/2},$$

де m - маса носія електричного заряду.

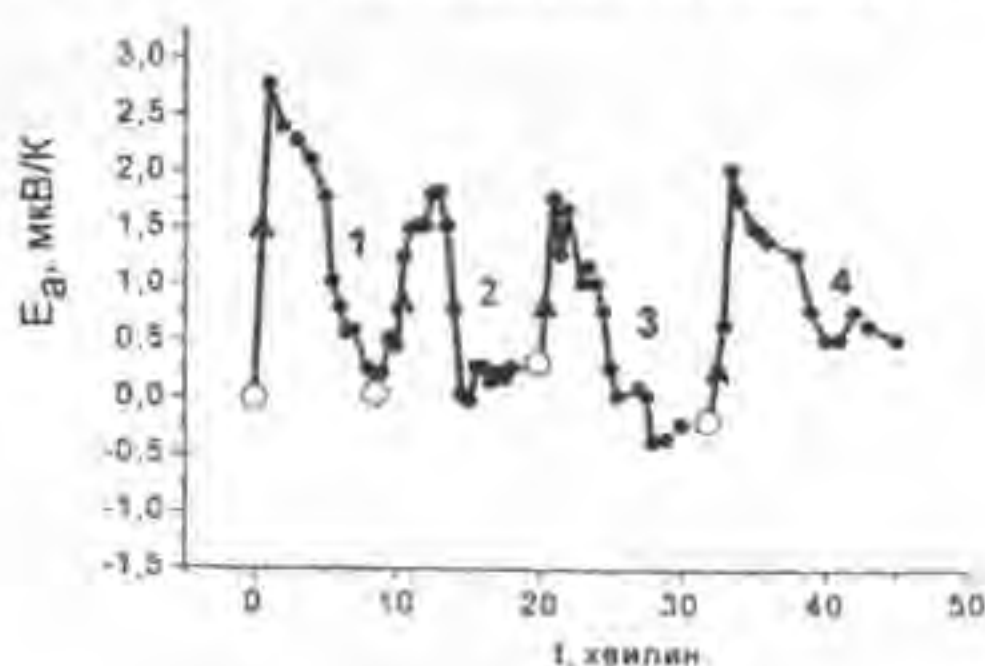


Рис. 4. Залежність від часу t термо-е.р.с. E_a , обумовленої адсорбцією хромовим порошком етанолу у концентрації 1,5 об.%; 3; 3; 3 (криві 1, 2, 3, 4 відповідно).

Вздовж вісі ОХ (рис.7) не прикладена стороння електронапряга, а контактна різниця потенціалів - нульова, бо частинки порошку однакові. Тому (2) одержано за умови $U_1 = U_3 = 0$.

Згідно (2) термострум вздовж термодари тим більший (і більша термо-е.р.с.), чим менша висота U_2 і ширина ω потенціального бар'єру, чим більша кінетична енергія носія E_1 в гарячій

частинці порошку. При адсорбції молекул етанолу поверхню частинок порошку в зазорі (рис. 7) виникає подвійний ізоляційний шар. Тому зменшується ширина потенціального бар'єру ω і, напевно, зростає його висота U_2 , бо молекули етанолу не проводять електрики, блокують тунелювання більше, ніж повітря в зазорі. Це конкуруючі процеси, які ведуть, згідно (2) як до збільшення термоструму, так і до його зменшення внаслідок адсорбції.

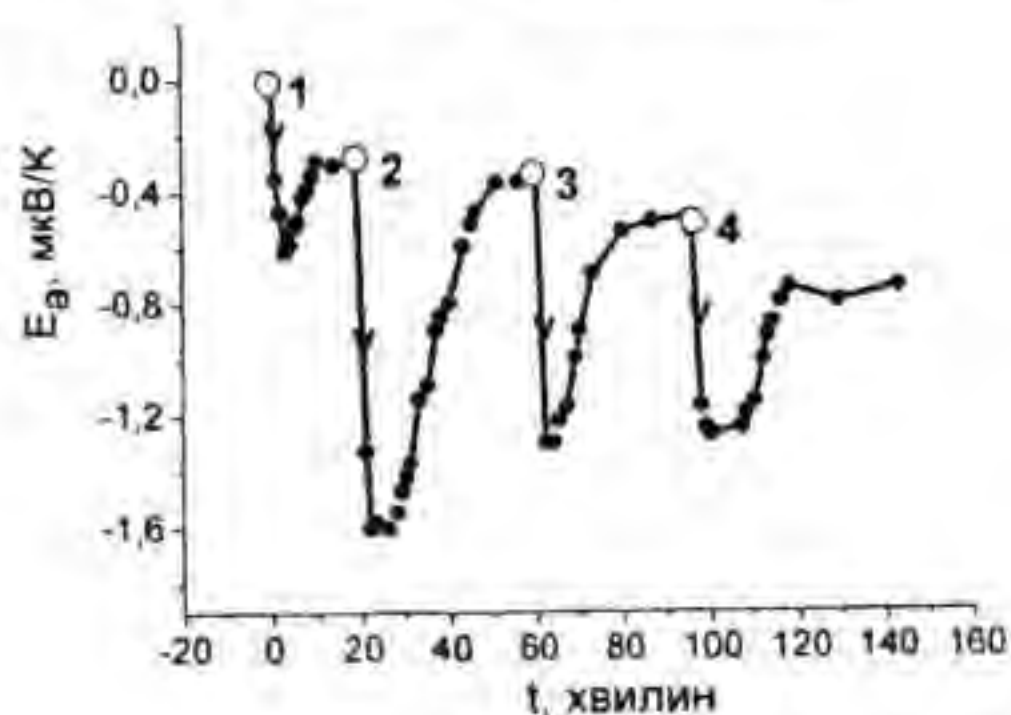


Рис.5. Залежність від часу t термо-е.р.с. E_a , обумовленої адсорбцією графітовим порошком етанолу у концентрації 3 об.%; 6; 6; 6 (криві 1, 2, 3, 4 відповідно).

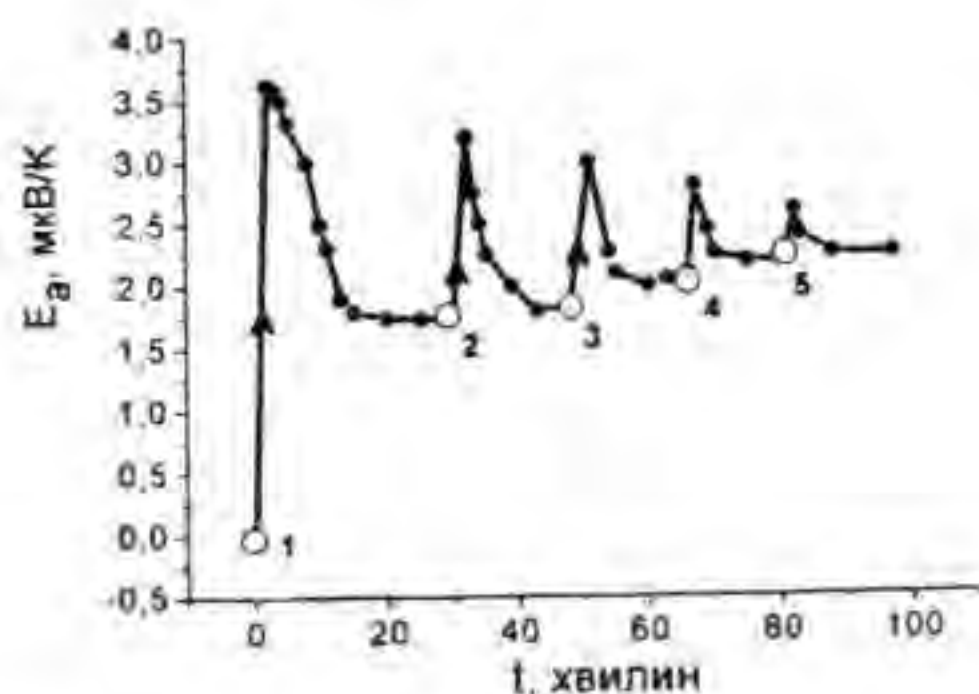


Рис.6. Залежність від часу t термо-е.р.с. E_a , обумовленої адсорбцією-десорбцією порошком ТРГ етанолу у концентрації по 1 об. % (криві 1, 2, 3, 4, 5).

В порошках міді, заліза, хрому, ТРГ (рис. 2, 3, 4, 6) внаслідок адсорбції зростає термо-е.р.с. ($E_a > 0$), отже, переважає фактор зменшення ω . В графітовому порошку (рис.5) $E_a < 0$, отже, переважає фактор зростання U_2 внаслідок адсорбції. Графітовий порошок одержаний розмелюванням полікристалічного графіту

(спектрально чистого). В нього питома поверхня набагато менша за питому поверхню ТРГ, тому товщина шару адсорбованих молекул набагато менша, переважає фактор U_2 .

У всіх досліджених порошках зменшується E_a зі збільшенням кількості циклів адсорбції. Явно це прослідковується для ТРГ (рис. 8, 9). Подібне явище спостерігається при вивченні зміни внаслідок адсорбції інших параметрів адсорбента [4, 5]. Насичення параметру часто настає внаслідок поступового формування суцільного одномолекулярного шару адсорбата на поверхні адсорбента. В ТРГ це настає вже після четвертого циклу (рис.9).

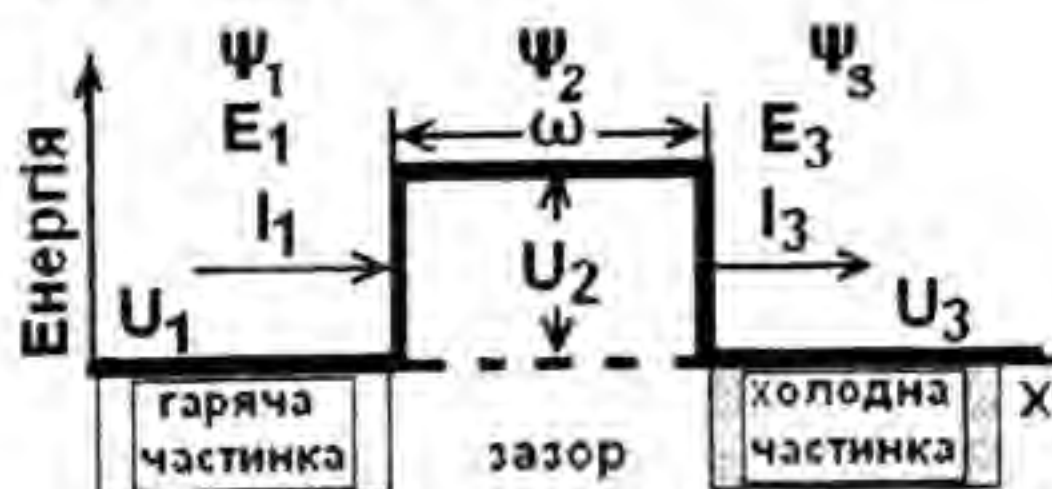


Рис.7. Схема тунелювання термоелектронів з гарячої порошокинки в холодну (I_1 , I_3 - термоструми).

Зміну ω і U_2 можуть обумовлювати, окрім фізичної адсорбції, й інші фактори:

- на поверхні частинок металевих порошків є оксиди, які частково можуть відновлюватись етанолом;
- можливі реакції метал - етанол з утворенням алкоголятів.

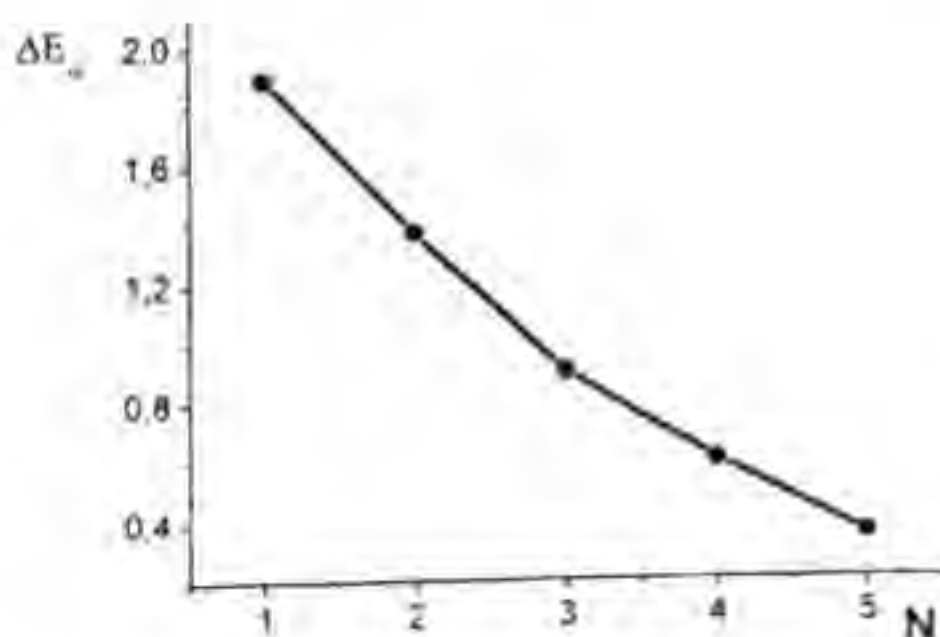


Рис.8. Зміна приросту ΔE_a ТРГ в циклі адсорбція - десорбція від номера циклу N .

Це призводить до «отруєння» адсорбента, до втрати адсорбційної здатності.

В роботі [1] детально вивчено механізми генерації термо-е.р.с. у вуглеграфітових монолітних (спечених) матеріалах. Ми не розглядаємо ці механізми при поясненні генерації E_a , бо вони працюють в об'ємі частинок порошку, в той час, як E_a формується внаслідок явища фізичної адсорбції на поверхні без дифузії молекул етанолу всередину об'єму частинок.

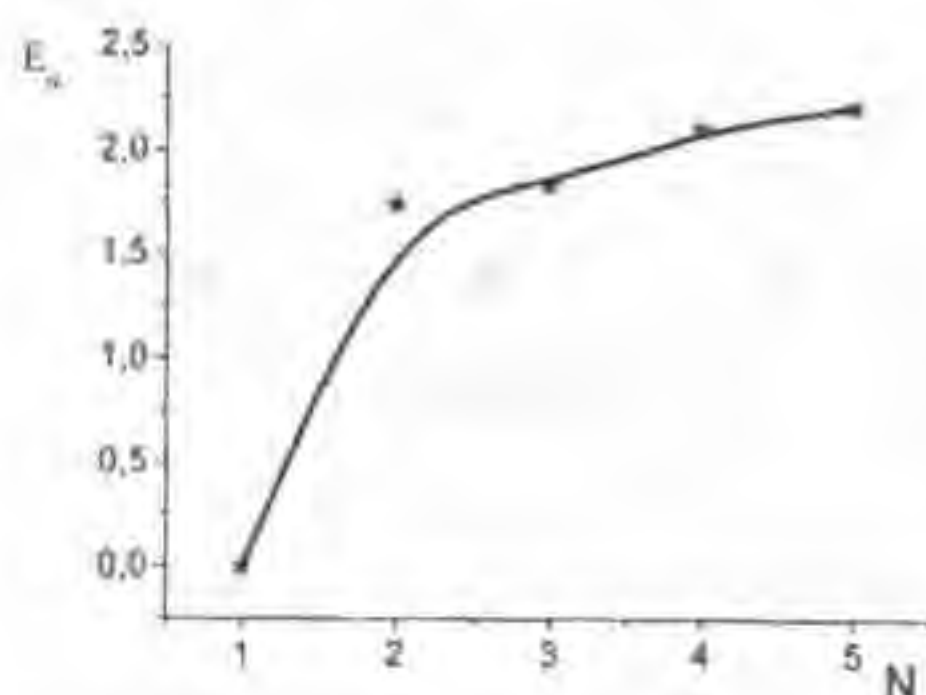


Рис.9. Залежність від номера N циклу адсорбція – десорбція E_a , що генерується порошком ТРГ після часткової десорбції внесеного в порошок на початку циклу алкоголю в концентрації 1 об.%,

Висновки

1. Вперше експериментально доведено, що при адсорбції молекул неелектропровідної рідини (наприклад, етанолу) порошками міді, заліза, хрому, спектрально-чистого та терморозширеного графітів змінюється термо-е.р.с. на величину E_a . Явище названо термоелектричним адсорбційним ефектом.
2. Приріст E_a обумовлений тунелюванням зарядів (електронів, дірок) від гарячої частинки порошку до холодної через зазор між ними, тобто, потенціальний бар'єр шириною ω і висотою U_z .
При адсорбції молекул етанолу ω зменшується (E_a зростає), а U_z збільшується (E_a зменшується). Ці два конкуруючі ефекти і визначають результуючу зміну E_a .
3. Зі збільшенням кількості циклів адсорбція – десорбція зменшується E_a , що можна пояснити рівновагою впливу на E_a конкуруючих параметрів ω і U_z .

Список використаних джерел

1. Мацуї Л.Ю. Структура та електрофізичні властивості вуглеграфітових матеріалів і інтеркальованих сполук на їх основі. Автореферат доктор. дисертації (Київ: Київський національний університет імені Тараса Шевченка: 2005. - 40 с.
2. А.А.Лухвич. Влияние дефектов на электрические свойства металлов.- Минск: Наука и техника, 1976. - 102 с.
3. Л.Солимар. Туннельный эффект в сверхпроводниках и его применение.- М.: Мир, 1974. - 428 с.
4. Адсорбция из растворов на поверхностях твердых тел. Под. ред. Парфитта Г.Д. М.: Мир, 1986. 280 с.
5. Семко Л.С., Кручек Е.И., Горбик П.П., Шевляков Ю.А. Влияние магнитного поля на сенсорные характеристики композиционных материалов на основе нанокристаллического никеля // Химия, физика и технология поверхности. - 2008.- вып.14.- С.398-406.
6. Копань В.С., Хуторянська Н.В., Копань Ю.В. Термоелектричний адсорбційний ефект в порошку активованого вугілля // Вісник Київського університету, Серія: фіз.-мат. науки. – 2010. – №2– С. 215-218.
7. Копань В.С., Хуторянська Н.В., Копань Ю.В. Термоелектричний адсорбційний ефект у вуглецевих і металевих порошках. // Праці II Міжнар. наукової конф. "Сучасні проблеми фізики конденсованого стану", 6-9 жовтня 2010. Київ.- фізичний ф-т КНУ.- С. 70-71.
8. Копань В.С., Хуторянська І.А., Копань Ю.В. Термоелектрорушійна сила промислових адсорбентів.// Праці II Міжнар. наукової конф. "Сучасні проблеми фізики конденсованого стану". 6-9 жовтня 2010. Київ.- фізичний ф-т КНУ.- С.93-94.

Надійшла до редколегії 12.10.2010.

УДК 539.213

Лисов В.І., д.ф.м.н., проф.,
Цареградська Т.Л.*, к.ф.м.н., доц.,
Турков О.В., інж.,
Саєнко Г.В., асп.,
Абібуласва Л.Ф., студ.

Дослідження впливу термообробки на температурно-часову стабільність аморфних сплавів

Для аморфних сплавів $Fe_{77.5}B_{16}Si_2Ni_{3.5}Mo_1$, $Fe_{80}B_{14}Si_6$ та $Fe_{76.2}B_{14}Si_6Ni_{3.8}$ проведено експерименти по термообробці з метою отримання сплавів в наноструктурному стані. За допомогою високочутливої дилатометричної методики були визначені температури початку інтенсивної кристалізації для вихідних зразків та тих, що пройшли термообробку. Показано, що запропоновані режими термообробки приводять до підвищення стабільності аморфних сплавів, про що свідчить збільшення температури початку інтенсивної кристалізації. Отримано сплави в нанокристалічному стані за допомогою запропонованого методу термообробки, що підтверджується результатами рентгено-дифракційних експериментів.

Ключові слова: аморфні сплави, термодинамічна стабільність, нанокристалізація

tsar_grad@univ.kiev.ua

Вступ

Велика увага до термічної обробки сплавів з аморфною структурою пов'язана з можливістю набуття особливих властивостей в нанокристалічному стані. Вихідний метастабільний аморфний стан, що отримується надшвидким гартуванням, не завжди має оптимальні характеристики, тому актуальним напрямком досліджень металевих стекло є розробка методів керованого наноструктурування в процесі термообробки [1]. На сьогоднішній день відомо, що властивості аморфних сплавів залежать від умов їх отримання і подальшої обробки. Зовнішні дії, такі як опромінення частками різної природи і відпал при температурах значно нижчих за температуру кристалізації (низькотемпературний відпал), приводять до зміни електропровідності, намагніченості, механічних характеристик [2]. Існує ще один тип температурного впливу, дослідження якого було розпочато лише останнім

V.I. Lysov, Dr.Sc., Prof.,
T.L. Tsaregradskaya, PhD.,
O.V. Turkov, eng.,
G.V. Saenko, eng.,
L.F. Abibulaeva, stud

The researches of influence of heat treatment on thermal stability of amorphous alloys

For the amorphous alloys $Fe_{77.5}B_{16}Si_2Ni_{3.5}Mo_1$, $Fe_{80}B_{14}Si_6$ and $Fe_{76.2}B_{14}Si_6Ni_{3.8}$ the experiments on heat treatment with the purpose of receipt of alloys in the nanocrystalline state are conducted. By the highly sensitive dilatometric method there were certain temperatures of beginning of intensive crystallization for initial alloys and alloys after heat treatment. It is rotined that brings the offered modes over of heat treatment to the increase of stability of amorphous alloys, to what testifies the increase of temperature of beginning of intensive crystallization. Alloys are got in the nanocrystalline state by the offered method of heat treatment that is confirmed the results of X-rays diffraction experiments.

Key words: amorphous alloys, thermodynamics stability, nanocrystallization

часом – це кріообробка (загартування при температурі рідкого азоту (77 K) з метою „заморожування” отриманої наноструктури (кріообробка) [3]. Такий вид обробки, призводить до зміни макроскопічних властивостей аморфних сплавів, а також підвищує часову і температурну стабільність сплавів, що є дуже важливим з точки зору практичних застосувань.

1. Дилатометричні дослідження впливу термообробки на стабільність багатокомпонентних аморфних сплавів

Для аморфних сплавів $Fe_{77.5}B_{16}Si_2Ni_{3.5}Mo_1$, $Fe_{80}B_{14}Si_6$ та $Fe_{76.2}B_{14}Si_6Ni_{3.8}$ проведено експерименти по термообробці з метою отримання сплавів в наноструктурному стані. Для досліджених сплавів отримано температурні залежності відносної зміни об'єму $\Delta V/V(T)$ для вихідних сплавів та сплавів після термообробки. Термообробка полягала в нагріванні зразків до температури

$\frac{T_k}{2} + 100\text{K}$, де T_k – температура повної кристалізації, наступній витримці при даній температурі на протязі однієї хвилини та різкому охолодженні до температурі рідкого азоту (77 K) з метою „заморожування” отриманої наноструктури (кріообробка). За допомогою високочутливої дилатометричної методики [4] були визначені температури початку інтенсивної

кристалізації для вихідних зразків та тих, що пройшли термообробку.

На рис.1-2 наведено температурні залежності відносної зміни об'єму $\Delta V/V(T)$ аморфних сплавів $\text{Fe}_{77.5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3.5}\text{Mo}_1$ та $\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$ при неперервному нагріванні для вихідних зразків та для зразків, що пройшли запропоновану термообробку.

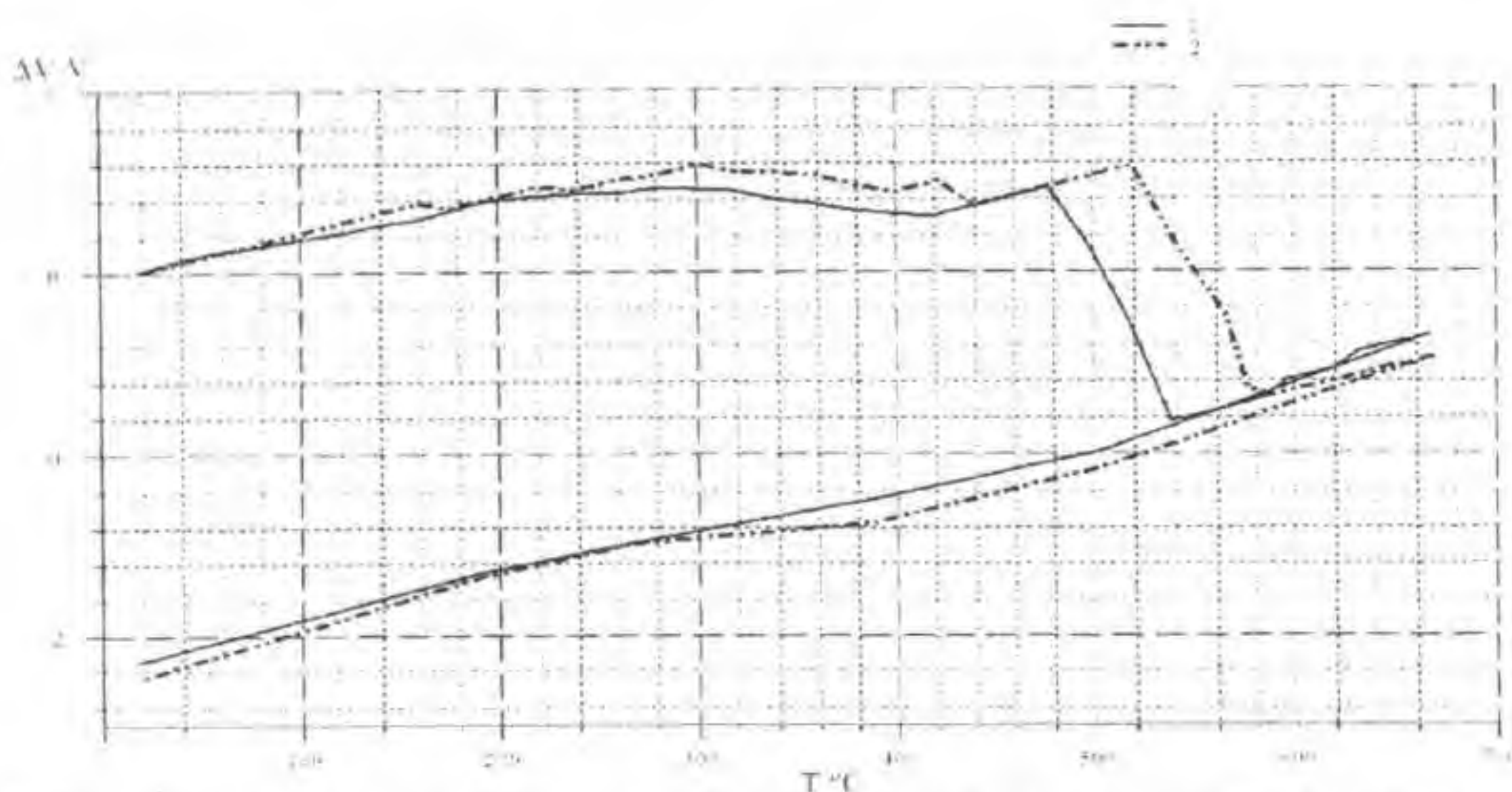


Рис.1. Температурна залежність відносної зміни об'єму при неперервному нагріванні $\Delta V/V(T)$ аморфного сплаву $\text{Fe}_{77.5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3.5}\text{Mo}_1$ для вихідного зразка (1) та для зразка після кріообробки (2)

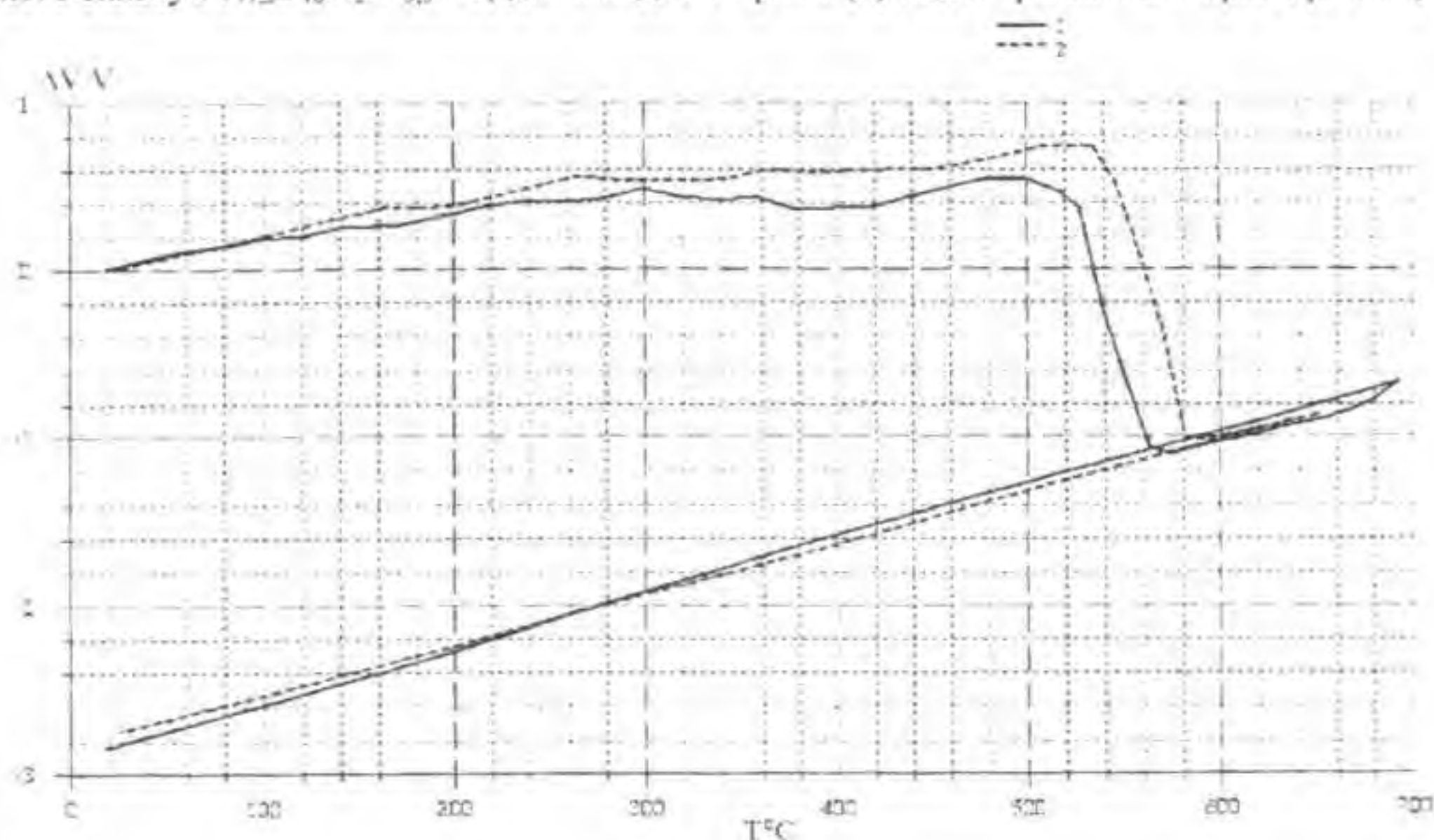


Рис.2. Температурна залежність відносної зміни об'єму при неперервному нагріванні $\Delta V/V(T)$ аморфного сплаву $\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$ для вихідного зразка (1) та для зразка після кріообробки (2)

В таблиці 1. наведено температури початку аморфних зразків та зразків, що пройшли інтенсивної кристалізації. для вихідних термообробку

Таблиця 1.

Склад аморфного сплаву	$T_k^1, ^\circ\text{C}$	$T_k^2, ^\circ\text{C}$
	(вихідний зразок)	зразок після термообробки: нагрівання до $\frac{T_k}{2} + 100\text{K}$ + кріообробка
$\text{Fe}_{77.5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3.5}\text{Mo}_1$	480	520
$\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$	500	540
$\text{Fe}_{76.2}\text{B}_{14}\text{Si}_6\text{Ni}_{3.8}$	500	525

З таблиці 1 видно, що запропонована термообробка приводить до збільшення інтервалу температурно-часової стабільності аморфних сплавів, про що свідчить збільшення температури початку інтенсивної кристалізації на (25-40)K.

2. Рентгенографічні дослідження впливу термообробки на структуру аморфних сплавів

На рис.3. представлено дифрактограму (1-й максимум) сплаву $\text{Fe}_{77.5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3.5}\text{Mo}_1$ в початковому аморфному стані (1) та після нагрівання зразка до $\frac{T_k}{2} + 100\text{K}$ + кріообробка (2).

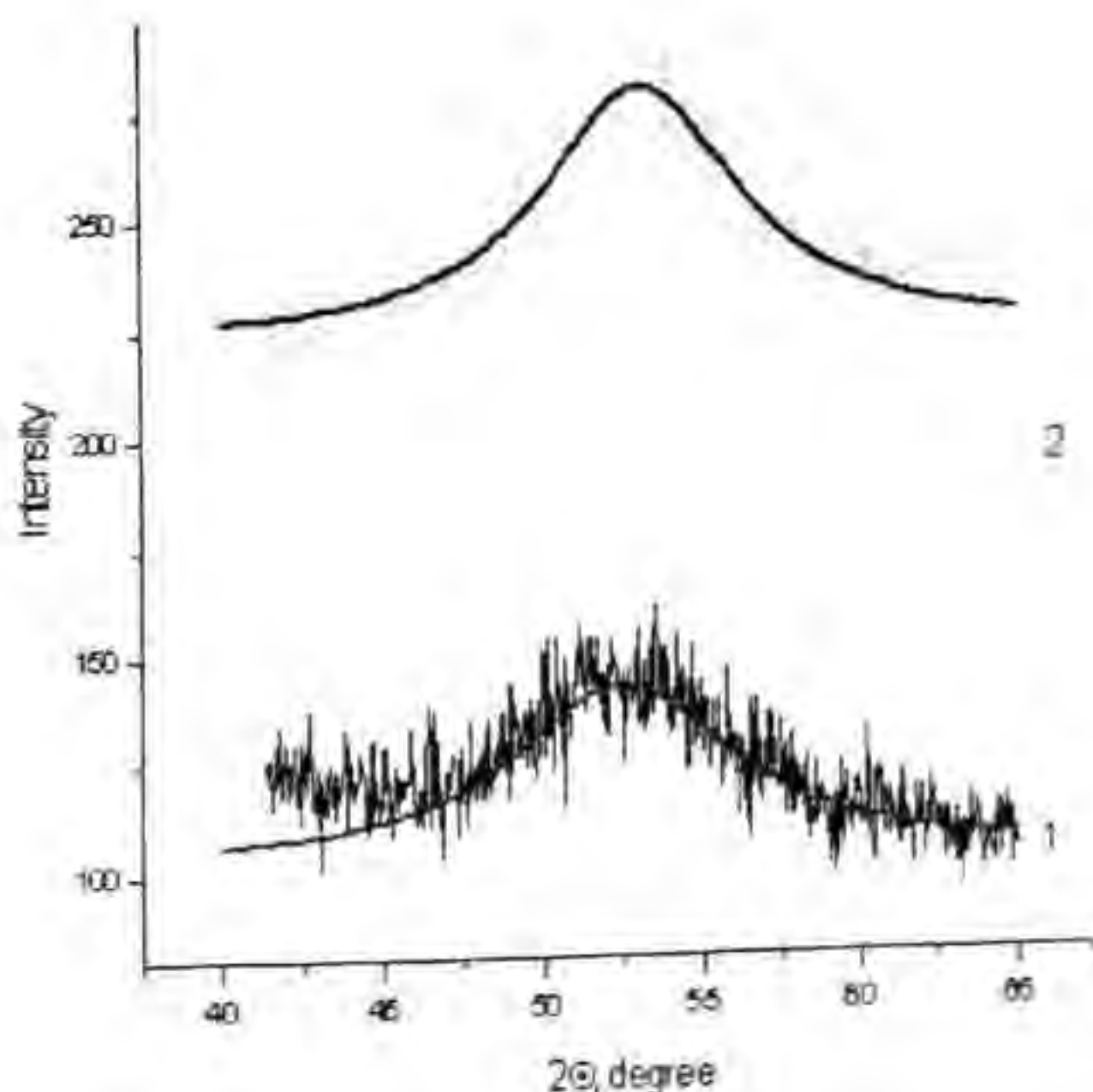


Рис.3. Дифрактограма (1-й максимум) сплаву $\text{Fe}_{77.5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3.5}\text{Mo}_1$ в початковому аморфному стані (1) та після нагрівання зразка до $\frac{T_k}{2} + 100\text{K}$ + кріообробка (2).

В таблиці 2 представлено визначені з дифрактограми параметри, а саме: кутове положення максимумів, значення напівширини дифракційної лінії, модуля хвильового вектору та розміру нанокристалів, оцінених за формулою Селякова-Шерера [5]:

$$L = \frac{\lambda}{\cos \theta \Delta},$$

де L – розмір нанокристалів, що складають зразок, λ – довжина хвилі рентгенівського випромінювання ($\lambda(\text{Co}) = 0,179026 \text{ нм}$), θ – кут дифракції (град), Δ – півширина дифракційної лінії (рад).

Таблиця 2

№	$\text{Fe}_{77,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_1$	$(2\theta)_{\text{max}}, ^\circ$	$\Delta, ^\circ$	$K = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \text{ (нм}^{-1}\text{)}$	$L, \text{ (нм)}$
1	Вихідний(аморфний) зразок	52,37	3,71	30,955	3,11
2	Після термообробки: нагрівання зразка до $\frac{T_k}{2} + 100 \text{ K} ++$ кріообробка	53,15	3,50	31,376	3,30

В дифрактограмах аморфних сплавів, що пройшли кріообробку у порівнянні з початковими спостерігаються наступні зміни: незначне зміщення положення дифракційного максимуму 2θ в бік більших кутів дифракції; зменшення півширини дифракційного максимуму Δ ; збільшення модуля хвильового вектора $K = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$ та збільшення розміру нанокристалів L . Загалом, зміни, що спостерігаються можна пояснити формуванням нанокристалічного стану.

Висновки

1. Запропоновані режими термообробки приводять до підвищення термічної стабільності досліджених аморфних сплавів $\text{Fe}_{77,5}\text{B}_{16}\text{Si}_2\text{Ni}_{3,5}\text{Mo}_1$, $\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$ та $\text{Fe}_{76,2}\text{B}_{14}\text{Si}_6\text{Ni}_{3,8}$, про що свідчить збільшення температури початку інтенсивної кристалізації на $(25-40) \text{ K}$.
2. За допомогою запропонованого методу термообробки отримано сплави в нанокристалічному стані, що підтверджується результатами рентгенодифракційних експериментів.

Список використаних джерел

1. Никифорова О.В. Влияние легирования на процесс кристаллизации при нагреве быстрозакаленных сплавов с аморфной структурой // Е.Л. Гюлиханданов, О.В. Никифорова, О.В. Толочко // Сборник трудов СПбГПУ «Научно-технические ведомости» - 2008. - Т. 4. - с. 103-107.
2. А.М. Глезер. Аморфные та нанокристаллические структуры: сходства, различия, взаимные переходы. Рос. хим. ж., 2002, т. XLVI, №5, с.57-63
3. M.E. Dokukin, N.S. Perov, Chong-Oh Kim, CheolGi Kim, «The cryogenic treatment effect on the magneto-impedance properties of the Co- and Fe-based amorphous ribbons», Physica Status Solidi (a), vol. 202, 2004
4. В.Н. Новиков, Б.Е. Рябчиков. Методика дилатометрических исследований металлических стекол. // Заводская лаборатория, 1989, т.55, 37, с.49-53.
5. Бокий Г. Б., Порай-Кошиц М.А. Рентгеноструктурный анализ. 1964. Т.1. Изд.2. С. 319.

Надійшла до редколегії 24.09.10

УДК 548:539.32

Онанко А.П., канд. фіз.-мат. наук, с.н.с.

Вплив опромінення на вказівну поверхню пружно-непружного тіла сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$

Після електронного опромінення на температурній залежності модуля пружності і внутрішнього тертя і (вказівної поверхні пружно-непружного тіла) сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ виявлено максимум внутрішнього тертя Q^{-1}_{MI} при температурі $T_{MI} \approx 560$ К.

Ключові слова: радіаційні точкові дефекти, тип ближнього порядку, модуль пружності, внутрішнє тертя, електронне опромінення.

E-mail: onanko@univ.kiev.ua

Ця робота є продовженням досліджування релаксацийних процесів в кристалічній решітці при радіаційній, термічній і ультразвуковій обробці на температурний спектр внутрішнього тертя (ВТ) Q^{-1} і модуль пружності E (вказівну поверхню пружно-непружного тіла) сплаву $AgZn$ [1], що упорядковується. Проведено вивчення впливу електронного опромінення на процеси ближнього упорядкування твердих розчинів $AgZn$, виявлені температурні інтервали утворення і перебудови ближнього порядку.

Опромінення конструкційних матеріалів при температурах експлуатації реакторів спричиняє зміни мікроструктури, механічних властивостей, зовнішніх розмірів внаслідок повзучості, явищ розпухання. Ці зміни обумовлені радіаційно-індукованою еволюцією мікроструктури. Основними механізмами деградації і розмірної нестабільності матеріалів у процесі опромінення є зсуви атомів у решітці, їхня наступна міграція і кластеризація, участь у процесах сегрегації.

Експеримент

Широкі можливості для модифікації сплавів мають термічно-ультразвукові і лазерно-ультразвукові методи. Опромінення здійснювалось на лінійному електронному прискорювачі ИЛУ-6 електронами з енергією $W \approx 1,5$ МеВ флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17}$ см⁻². Використовувались Ш-подібні зразки, що давало змогу добре визначати температуру T при вимірюванні ВТ та нерелаксованого модуля нормальної пружності E . ВТ визначалось за формулою $Q^{-1} = \ln 2 / \pi N$, де N –

Onanko A.P., PhD, Sen. Sci. Res.

Influence of irradiation on indicatory surface of elasticity-inelasticity state of $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ alloy

The maximum of internal friction Q^{-1}_{MI} was observed after electron irradiation on the temperature dependence of elastic module and internal friction (indicatory surface of elasticity-inelasticity state) of $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ alloy at temperature $T_{MI} \approx 560$ K.

Key words: radiation point defects, type nearing order, elastic module, internal friction, electron irradiation.

число коливань, вимірюваних електронним частотоміром, за час зменшення амплітуди в 2 рази. Модуль нормальної пружності E визначався за формулою:

$$E = 38,24 \cdot \rho l^3 f^2 / h^3 (1 - \alpha T), \quad (1)$$

де l , h – довжина, товщина зразка, ρ – густина, f – резонансна частота коливань зразка, α – коефіцієнт лінійного розширення зразка, T – температура. Також для виміру температурних залежностей ВТ і модуля пружності E сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ після механічного різання і шліфування використовувався метод чотирьохскладового п'єзоелектричного вібратора на частоті $f \approx 117$ кГц при знакозмінній деформації $\epsilon \approx 10^{-6}$ у вакуумі $P \approx 6,6 \cdot 10^{-4}$ Па [1-4]. Погрішність виміру відносної зміни модуля пружності $\Delta E/E \approx 0,1\%$, а виміру ВТ $\Delta Q^{-1}/Q^{-1} \approx 2\%$.

Результати і їх обговорення

Неруйнівний метод внутрішнього тертя (ВТ) дозволяє встановити спектр структурних дефектів по аналізу положень максимумів ВТ, по тривалості релаксації τ та по їх внеску в затухання пружних коливань. В залежності від характеру навантаження явище механічної релаксації в сплаві може проявлятися як ВТ, як релаксація напруження $\sigma(\omega)$ чи повзучість $\dot{\epsilon}$. Пружні характеристики залежно від умов визначаються релаксованими чи нерелаксованими модулями пружності E . Використання для визначення енергії активації H температурного положення

Представлено: член-кор. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Макара В.А

максимуму ВТ T_m і вимірюваної з високою точністю частоти коливань зразка f_m не вимагає спеціальних умов. При релаксацийних процесах температурне положення T_m кожного максимуму ВТ легко вимірюється, і частота f_m задається експериментально. На рис. 1 наведено температурну залежність ВТ сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ після електронного опромінення.



Рис. 1. Температурна залежність внутрішнього тертя Q^{-1} сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ після електронного опромінення флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

Після електронного опромінення флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ спостерігалася сталість фону ВТ $Q^{-1}_f \approx 15 \cdot 10^{-4}$ до $T \approx 470 \text{ K}$ і різке експоненціальне зростання фону Q^{-1}_f при більш високих температурах $T > 600-610 \text{ K}$. На температурній залежності E сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ спостерігалась релаксація модуля пружності $\Delta E/E$ при $T \approx 610 \text{ K}$. Виявлено максимум ВТ ($Q^{-1}_{M1} - Q^{-1}_f$) $\approx 20 \cdot 10^{-4}$ шириною $\Delta T_{M1} \approx 25 \text{ K}$ при $T_{M1} = 560 \pm 10 \text{ K}$. Відпал радіаційних дефектів викривляє вигляд температурного спектру ВТ. При відпалі має місце ухід міжвузлових атомів J , вакансій V , домішок.

Для максимуму ВТ умова його існування записується у вигляді [5,6]:

$$\omega \tau_0 \exp(H/k_B T_M) = 1, \quad (2)$$

де k_B – стала Больцмана. З рівняння (2) випливає, що $H = k_B T_M \ln(1/\omega \tau_0)$. Підставляючи $\tau_0 = 1/f_0 = h/k_B T_m$, одержуємо формулу для визначення енергії активації H максимуму ВТ:

$$H = k_B T_M \ln(k_B T_M / hf_m) + \Delta S, \quad (3)$$

де T_m і f_m температура і частота максимуму ВТ Q^{-1}_M відповідно. Ентропійна добавка ΔS перебуває в межах похибки експерименту; точність визначення енергії активації H максимуму ВТ залежить головним чином від точності підтримки температури зразка (2 K) $\approx (2\%)$.

Енергія активації H максимуму ВТ оцінювалася за формулою (3) Верта-Маркса. Для домінуючого максимуму ВТ Q^{-1}_{M1} при $T_{M1} \approx 560 \text{ K}$ було отримано значення енергії активації $H_1 = 0,89 \pm 0,1 \text{ eV}$. З умови існування релаксацийного максимуму ВТ (2) визначили постійну часу релаксації $\tau_{01} \approx 1,3 \cdot 10^{-14} \text{ сек}$ і частотний фактор релаксації $f_{01} \approx 7,4 \cdot 10^{13} \text{ Гц}$.

Модуль пружності E – відношення прикладеної напруги σ до сумарної деформації ϵ кристалу. При механічному напруженні реального кристалу сумарна деформація складається з пружної та непружної компонент. Пружна деформація відбувається "миттєво", а непружна має временну залежність. Термопластичні напруги σ , релаксують з утворенням дислокацій, які рухаються, що призводить до пластичної течії. Модуль пружності E є чутливою характеристикою процесів фізико-хімічної взаємодії при зміні типу упорядкування по границям розділу фаз. Є два лімітних значення пружних модулів: нерелаксацийний E_{nr} і релаксацийний модуль пружності E_r . При приложенні зовнішнього періодичного напруження з частотою ω динамічний пружний модуль в експерименті має проміжне значення $E_r < E < E_{nr}$. Результати вимірювання температурної залежності модуля пружності E сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ після електронного опромінення представлені на рис.2.

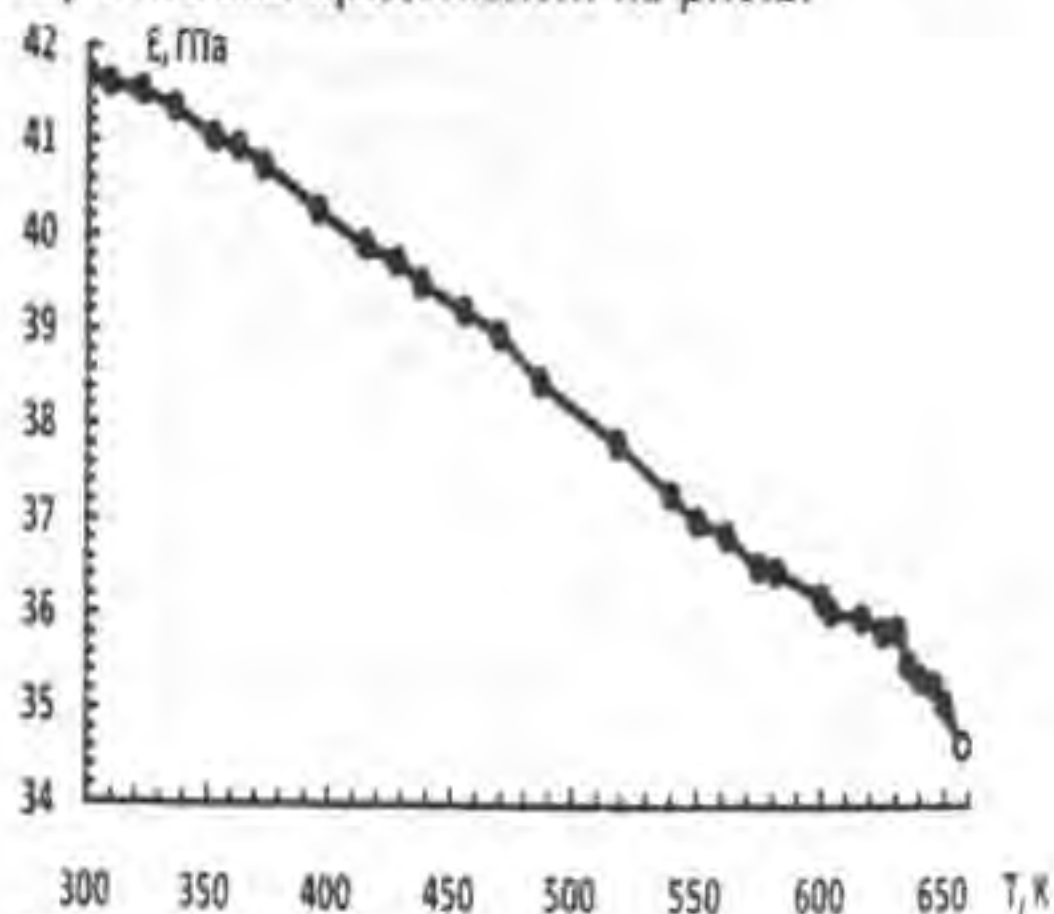


Рис. 2. Температурна залежність модуля пружності E сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ після електронного опромінення флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

На рис.2 температурній залежності E сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ спостерігалась релаксація модуля пружності $\Delta E/E$ при $T \approx 610$ К. $\Delta E/E = (E - E_0)/E_0 = \Delta/(1 + \omega^2\tau^2)$, де максимальний дефект модуля $\Delta = (E_{нр} - E_r)/E_{нр}$, $E_{нр}$ - нерелаксаційний, E_r - релаксаційний модуль пружності. $E_{нр}$ вимірювався у час прикладення напруги σ , коли непружний вклад у деформацію $\epsilon_{нр} = 0$; E_r вимірювався після інтервалу часу $\Delta t \gg \tau$, коли непружна деформація максимальна $\epsilon_{нр} = \max$. Значення Δ визначається кількістю мікрорелаксаторів різного типу і їх індивідуальним вкладом в непружне деформацію при даній температурі T . Має місце суперпозиція вкладів різних мікрорелаксаторів. При температурах, коли дефект модуля пружності $\Delta E/E$ різко зростає, на температурних залежностях спостерігаються релаксаційні максимуми ВТ. Значна ширина по температурі релаксації модуля пружності $\Delta E/E$ вказує на широкий розподіл активаційних параметрів H відповідних релаксаційних процесів.

На рис.3 представлена температурна залежність вказівної поверхні пружно-непружного тіла сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ після електронного опромінення.

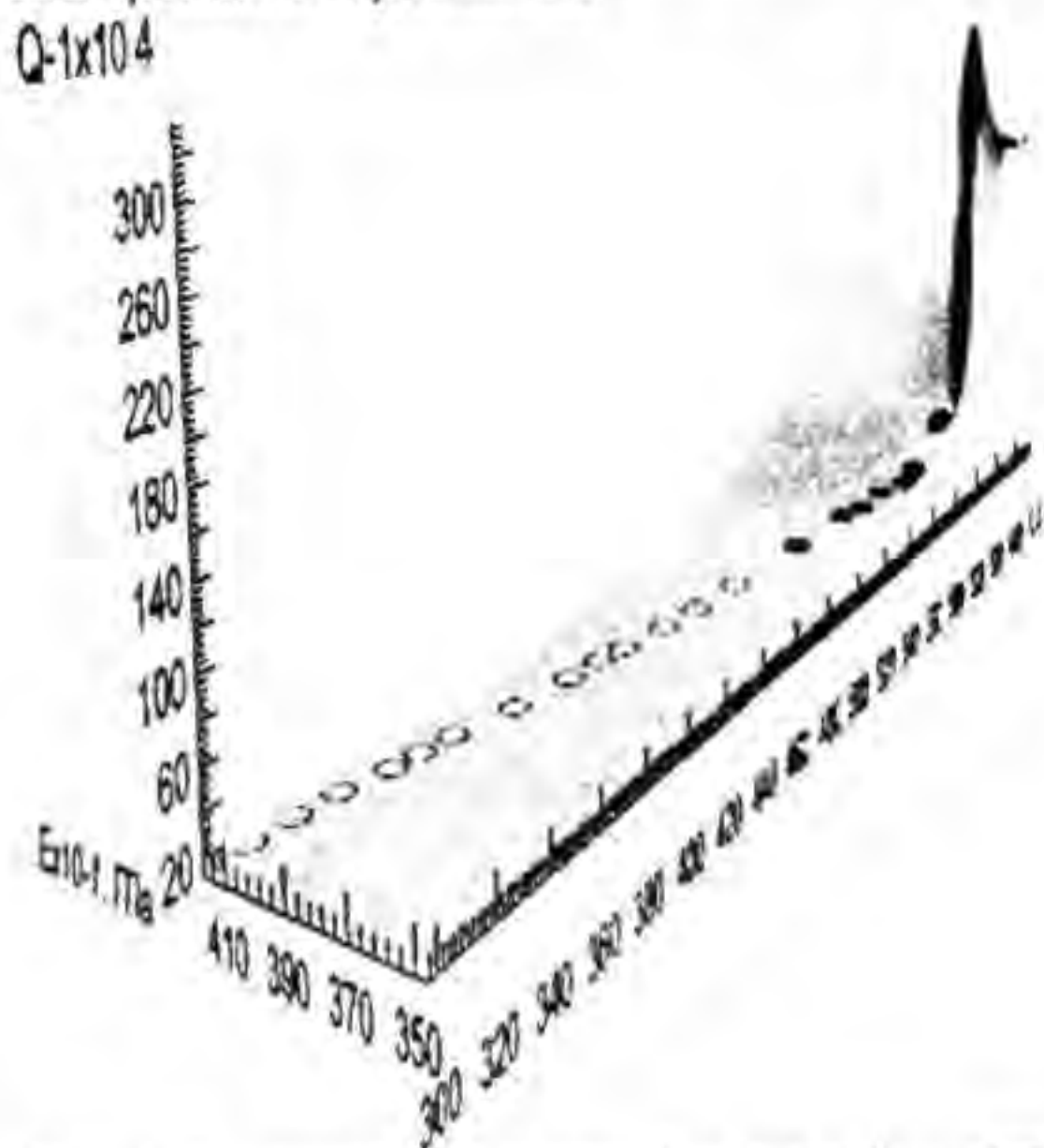


Рис. 3. Температурна залежність внутрішнього тертя Q^{-1} і модуля пружності E (вказівної поверхні пружно-непружного тіла) сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ після електронного опромінення флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

На рис.4 наведено температурну залежність ВТ сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ при повторному нагріві після електронного опромінення.

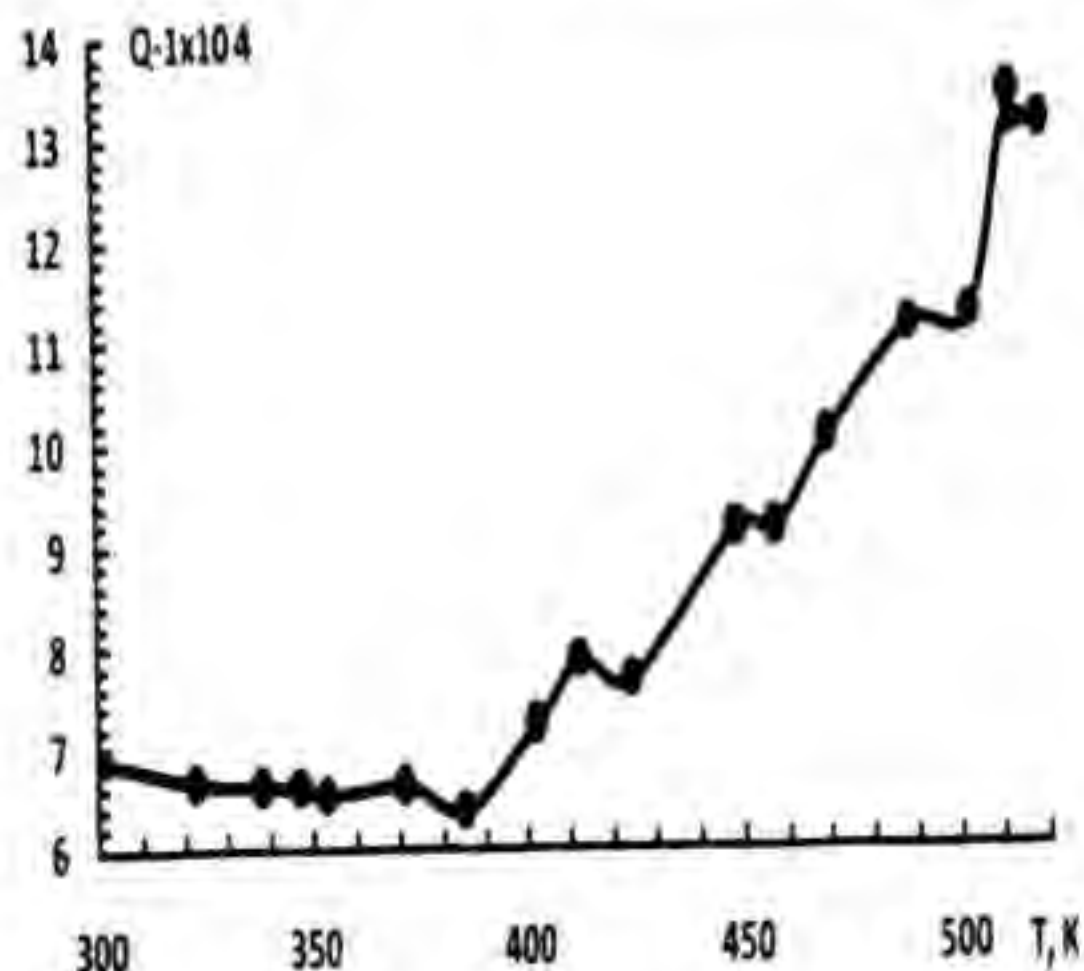


Рис. 4. Температурна залежність внутрішнього тертя Q^{-1} сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ при повторному нагріві після електронного опромінення флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

На рис.5 наведено температурну залежність модуля пружності E сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ при повторному нагріві після електронного опромінення.

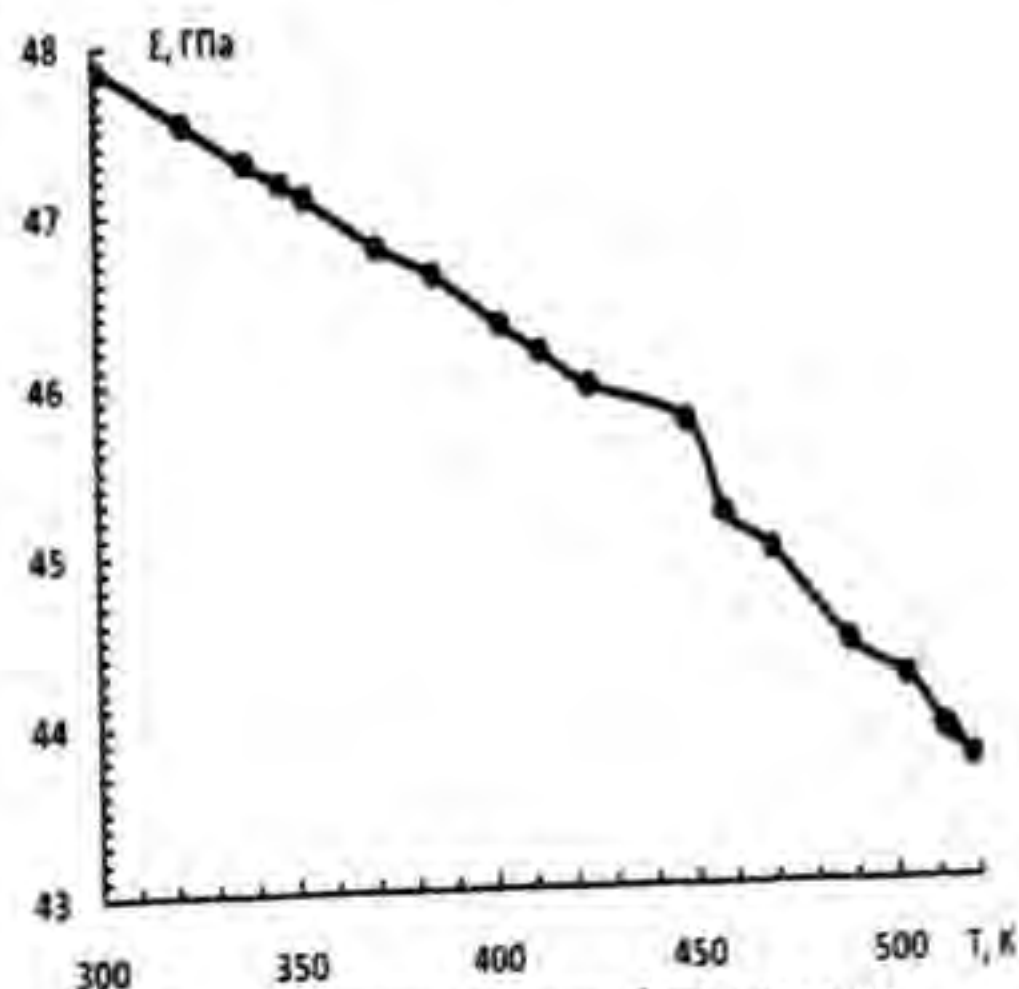


Рис. 5. Температурна залежність модуля пружності E сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ при повторному нагріві після електронного опромінення флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

На рис. 5 модуль пружності E лінійно зменшувався, що пояснюється теорією ангармонізму кристалів з врахуванням квадратичних членів [4]. Зменшення пружного модуля E не було пов'язане з дислокаційним гістерезисним процесом, оскільки при вимірюванні амплітудної залежності ВТ до і після опромінення ВТ було амплітудно-

незалежним. В роботі пропонується графічний метод обробки експериментальних даних амплітудної залежності внутрішнього тертя (АЗВТ) у координатах електричної напруги на кварці-генераторі в залежності від напруги на кварці-приймачі $U_r = f(U_n)$ складного п'єзоелектричного вібратора. На рис.6 представлена температурна залежність вказівної поверхні пружно-непружного тіла сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ при повторному нагріві після електронного опромінення.

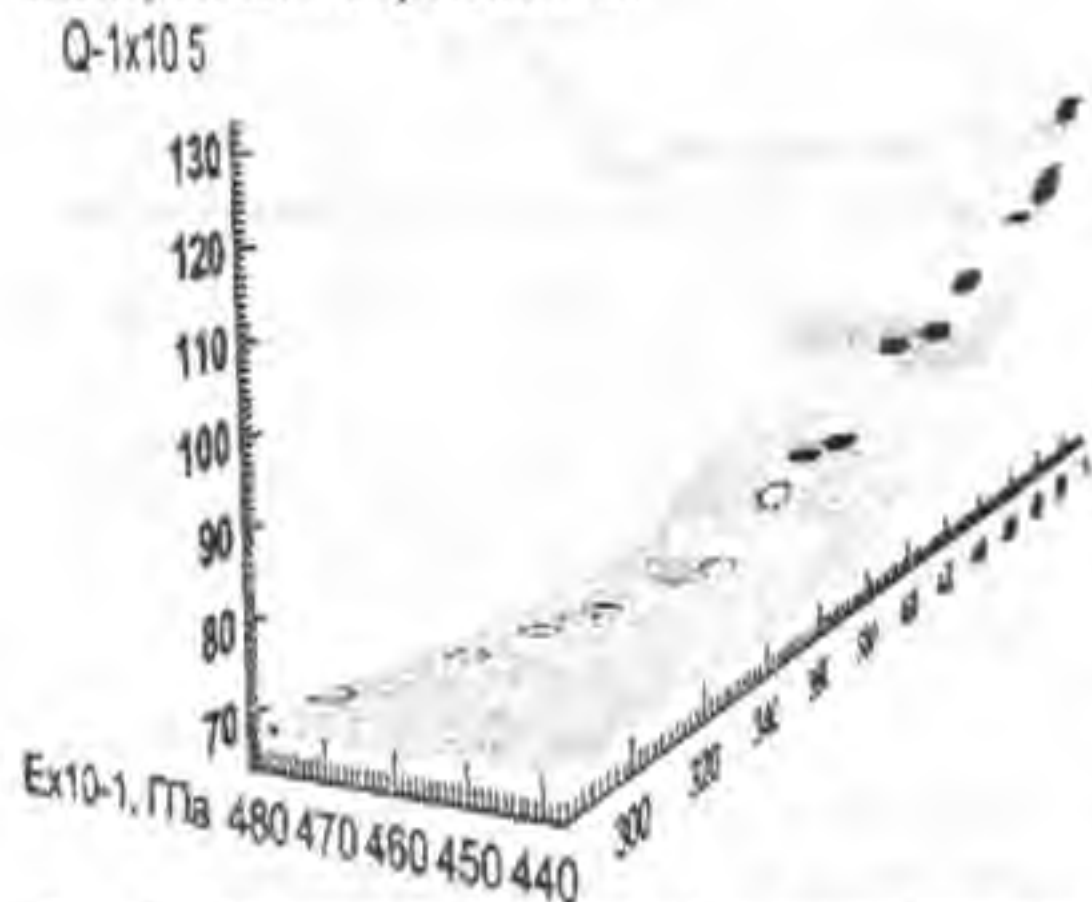


Рис. 6. Температурна залежність внутрішнього тертя Q^{-1} і модуля пружності E (вказівної поверхні пружно-непружного тіла) сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ при повторному нагріві після електронного опромінення флюенсом $\Phi \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

У твердому розчині $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ у температурному інтервалі $\Delta T = 620 \div 300 \text{ K}$ відбувається зміна типу упорядкування від L_{12} типу до низькотемпературного δ -фази. Характер зміни залишкового електроопору $\rho(T)$ пояснюється існуванням ближнього порядку різних типів у різних температурних діапазонах, прообразом яких є відповідні фази. Спостерігався максимум залишкового електроопору $\rho(T)$ для сплаву $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ при $T_{mp} \approx 610 \text{ K}$. Хід залежностей $\rho(T)$ для загартованих і відпалених зразків свідчив про оборотність процесів, що відбувались.

У неоднорідно деформованому сплаві $Ag_{0.8}Zn_{0.2}$ для дифузії домішок типовими ознаками є наявність розподілу домішок за глибиною та великі значення глибин проникнення домішок. Встановлення низькотемпературного типу ближнього порядку утруднено через малу дифузійну рухливість атомів. Коефіцієнт дифузії міжвузлових атомів D_I на кілька порядків більший за коефіцієнт дифузії вакансій D_V , який, у свою чергу, більший за коефіцієнт

самодифузії D_I . В результаті опромінення електронами з енергією $W \approx 1,5 \text{ MeV}$ спостерігалось зменшення залишкового електроопору $\rho(T)$ і параметрів Каулі на першій координаційній сфері, що свідчило про поглиблення процесу перебудови ближнього порядку по низькотемпературному типу.

Вимірювання фону ВТ Q^{-1}_f після різних термообробок дає інформацію про зміни полів термopужних напруг σ_i . Зростання висот максимумів ВТ Q^{-1}_m свідчить про зростання концентрації дефектів, а уширення максимумів ΔQ^{-1}_m при цьому відображує процес релаксації нових типів структурних дефектів. У сплавах $AgZn$ у температурному інтервалі $\Delta T = 570 \div 300 \text{ K}$ відбувається зміна типу упорядкування від L_{12} типу до низькотемпературного δ -фази. При опроміненні розширюються температурні межі існування сегрегацій. Введені внаслідок електронного опромінення міжвузлові атоми I і вакансії V стимулюють дифузійні процеси. Таким чином, передбачається, що виявлена релаксація модуля пружності $\Delta E/E$ обумовлена ближнім упорядкуванням [5].

Список використаних джерел

1. Онанко А.П. Вказівна поверхня пружно-непружного тіла сплаву $Ag_{0.9}Zn_{0.1}$ // Вісник Київського університету. Сер.: фізико-математичні науки. - 2009. - №1. - с. 267-270.
2. Онанко А.П., Подолян А.А., Островский И.В. Влияние ультразвуковой обработки на внутреннее трение в кремнии // Письма в ЖТФ. - 2003. - Т. 29, вып.15. - с. 40-44.
3. Kravtsov M.V., Lyashenko O.V., Onanko A.P. Relaxation of defect structure in ultrasonic wave field and acoustic emission in LiF single crystals // Photoelectronics. - 2004. - №2. - p. 353-355.
4. Lyashenko O.V., Onanko A.P., Veleschuk V.P., Lyashenko I.O., Onanko Y.A. Structural defects relaxation during complex thermal and dynamical mechanic processing of CdTe // Photoelectronics. - 2008. - №17. - p. 10-13.
5. Новик А., Берри Б. Релаксационные явления в кристаллах. - М.: Атомиздат, 1975. - 472 с.
6. Александров Л.Н., Зотов М.И. Внутреннее трение и дефекты в полупроводниках. Новосибирск: Наука, 1979. - 158 с.

Надійшла до редколегії 12.01.10

УДК 536.75

Храпійчук Г.В., асп.,
Чалий О.В., проф., д.ф.-м.-н.,
Нурищенко Н.Є., д.ф.-м.-н.

Бародифузійні явища при активному транспорті іонів Na^+ і K^+ через клітинну мембрану

Розглянуто дію ультразвуку як впливової рушійної сили бародифузійних явищ при процесах активного транспорту іонів Na^+ і K^+ через мембрани клітин. Теоретично встановлено залежність абсолютного значення мембранного потенціалу при активному перенесенні іонів натрію і калію від інтенсивності ультразвуку та від перепаду тиску між позаклітинним та внутрішньоклітинним середовищами. Експериментально досліджено і проаналізовано залежність активності Na^+ , K^+ -АТФази від зміни інтенсивності та режиму ультразвукової хвилі.

Ключові слова: бародифузія, ультразвук, мембрана клітини

G.V. Khrapiychuk, PhD
A.V. Chalyi, Prof.
N.E. Nurischenko, Prof.

Barodiffusion phenomena at active transport of Na^+ and K^+ ions Through the cell membrane

The influence of ultrasound as the significant motive force of barodiffusion phenomena at the processes of active transport of Na^+ and K^+ ions through the cell membrane is considered. The dependence of membrane potential is theoretically estimated at active transport of sodium and potassium ions on the ultrasound intensity and pressure overfall between external and internal medium of the cell. The dependence of Na^+ , K^+ -ATPase activity on the change of intensity and type of ultrasonic wave is experimentally studied and analyzed.

Key words: barodiffusion, ultrasound, cell membrane.

ВСТУП

Клітина є живою системою, основна функція якої полягає в тому, щоб підтримувати стаціонарний стан при умові протікання дифузійних процесів між внутрішнім і зовнішнім середовищами. Якщо організм не здатний зберігати оптимальний електричний потенціал, то це призводить до порушення багатьох фізико-хімічних процесів. Пониження абсолютного значення електричного потенціалу на мембрані можна компенсувати за рахунок бародифузійних явищ, викликаних додатковим перепадом тисків, що виникає в біологічному середовищі клітини внаслідок дії ультразвукової хвилі (див., наприклад, [1]).

В даній роботі зосереджено увагу на ультразвуковому випромінюванні як впливовій рушійній силі бародифузійних явищ, а саме: на теоретичній залежності мембранного потенціалу від тиску та інтенсивності, а також на експериментальному встановленні залежності активності транспортних білків, які забезпечують активне перенесення речовини (в бік більшої концентрації), від інтенсивності. Створення принципово нових та ефективніше використання існуючих ультразвукових методик неможливе без вивчення механізмів утворення додаткового перепаду тисків між позаклітинним і внутрішньоклітинним середовищами під дією ультразвуку [1-3].

Добре відомо, що ультразвукове випромінювання належить до фізичних факторів, застосування яких викликає численні фізичні та біологічні зміни в живих системах організму [4-7]. Ультразвукова хвиля обумовлює появу в просторі ділянок більшого та меншого тисків, тому її можна вважати рушійною силою бародифузійних явищ. Завдяки міжмолекулярній взаємодії тиск передається в просторові області, де розташовані сусідні атомами (молекулами) речовини, тобто під дією ультразвуку області підвищеного та пониженого тиску переміщуються у в'язко-пружному середовищі.

Як відомо, акустична хвиля з інтенсивністю I викликає зміну тиску Δp в середовищі, де вона поширюється, у відповідності зі співвідношенням [8]:

$$\Delta p = \sqrt{2I\rho v}, \quad (1)$$

де ρv - акустичний опір середовища, ρ - густина середовища, v - швидкість ультразвукової хвилі.

Отже, ультразвук є причиною появи бародифузійних явищ, які пов'язані зі зміною тиску в середовищі, де поширюється ультразвукова хвиля.

ЗАЛЕЖНІСТЬ СТАЦІОНАРНОГО МЕМБРАННОГО ПОТЕНЦІАЛУ ВІД ЗМІНИ ТИСКУ

Потік речовини через плазматичну мембрану підтримує необхідні концентраційні градієнти та відповідний мембранний потенціал

Представлено: акад. НАН України,
д.ф.-м.н., проф. Л.А. Булавін

(див., наприклад, [9-11]). В [12] нами було теоретично встановлено, що стаціонарний потенціал спокою при пасивному транспорті (проти вектора градієнта концентрацій) збільшує своє абсолютне значення під дією бародифузійних явищ, які виникають внаслідок дії ультразвуку. Даний ж робота присвячена дослідженню впливу бародифузії на стаціонарний електричний потенціал при активному транспорті іонів Na^+ і K^+ через мембрану клітини в напрямку векторів градієнтів їхніх концентрацій.

Для опису стаціонарного потенціалу при активному транспорті іонів Na^+ і K^+ використаємо рівняння Томаса (див., наприклад, [13]), яке можна отримати з відомого рівняння Гольдмана-Ходжкіна-Катца, нехтуючи внесками всіх іонних струмів відтоку (хлорного струму та інших), а також враховуючи стехіометричне співвідношення для іонних струмів Na^+ і K^+ в одному циклі роботи натрій-калієвого насоса, а саме: $I_{Na}/I_K = \xi = 3/2$. В такому наближенні отримуємо наступний вираз для абсолютного значення електричного мембранного потенціалу, який враховує активний транспорт іонів Na^+ і K^+ :

$$\varphi_{act} = \frac{RT}{F} \ln \frac{\xi P_K [K]_i + P_{Na} [Na]_i}{\xi P_K [K]_e + P_{Na} [Na]_e} \quad (2)$$

В цій формулі використані такі позначення: $\varphi_{act} = |\varphi_e - \varphi_i|$ — різниця електричних потенціалів між зовнішнім і внутрішнім середовищем клітини; множник $\frac{RT}{F} \approx 25,2$ мВ при температурі $T = 293$ К; $[K]_i$, $[Na]_i$ та $[K]_e$, $[Na]_e$ — концентрації іонів калія і натрія всередині та зовні клітини, P_K і P_{Na} — проникності іонів, які визначають швидкість їх проходження крізь плазматичні мембрани клітини.

Виконаємо розрахунок бародифузійного внеску до мембранного потенціалу Томаса з урахуванням активного транспорту іонів Na^+ і K^+ за формулою (2) по аналогії з обчисленням цього внеску до стаціонарного потенціалу Гольдмана-Ходжкіна-Катца в роботі [12]. Результат базується на наступних наближеннях: 1) сумарна густина струму, зумовлена потоками всіх іонів через мембрану, дорівнює нулеві, тобто $J_{sum} = \sum \bar{J}_i = 0$ де $\bar{J}_i = e \bar{I}_i$, e — величина елементарного заряду, I_i — дифузійні потоки іонів певного сорту; 2) іонний струм Na^+ напрямлений в клітину, а іонний струм K^+ — із клітини назовні; 3) потік іонів через біомембрану відбувається при наявності двох термодинамічних сил — градієнтів концентрації ∇c та потенціалу $\nabla \varphi$. Потенціал на мембрані при активному транспорті іонів Na^+ та K^+ під дією додаткового перепаду тиску на клітинні мембрані має вигляд:

$$\varphi_{act}(\Delta p) = \frac{RT}{F} \left[\ln \frac{\alpha}{\beta} + \left(\frac{\delta}{\beta} + \frac{\delta}{\beta} f_0 - \frac{\chi}{\alpha} \right) \Delta p \right] \quad (3)$$

де

$$f_0 = \frac{1}{\ln \alpha / \beta} + \frac{\alpha}{\beta - \alpha}$$

Величини

$$\alpha = \xi P_K [K]_i + P_{Na} [Na]_i,$$

$$\beta = \xi P_K [K]_e + P_{Na} [Na]_e,$$

$$\chi = \xi P_K [K]_i \sigma_K + P_{Na} [Na]_i \sigma_{Na},$$

$$\delta = \xi P_K [K]_e \sigma_K + P_{Na} [Na]_e \sigma_{Na}$$

встановлюють зв'язок між концентраціями іонів Na^+ і K^+ , їх проникностями та стехіометричним коефіцієнтом ξ . Що стосується кінетичних коефіцієнтів σ_K та σ_{Na} , які характеризують внески в дифузійні потоки іонів Na^+ і K^+ , обумовлені різницею тиску з обох боків мембрани, то їх оцінка може бути проведена подібно до розрахунків коефіцієнтів Соре при вивченні впливу термодифузійних явищ на електричні мембранні потенціали спокою (концентраційний та стаціонарний) з роботи [14]. Тоді слід очікувати, що їх величина у водних розчинах, які містять достатньо малі концентрації іонів Na^+ і K^+ , наближено дорівнює оберненому критичному тиску води:

$$\sigma \approx \sigma_K \approx \sigma_{Na} = 4,6 \cdot 10^{-8} \text{ Па}^{-1}.$$

Величина додаткового тиску та його чисельне значення Δp , що визначає додатковий внесок в мембранний потенціал від бародифузійних явищ згідно з виразом (3), були обраховані за формулою (1) і наведені нижче в таблиці 1.

Таблиця 1. Значення додаткового перепаду тиску в крові при дії ультразвуку різних інтенсивності

Інтенсивність $N3$, Вт/см ²	Перепад тиску Δp , Па
0,12	$6,30 \cdot 10^2$
0,25	$9,09 \cdot 10^2$
0,5	$1,29 \cdot 10^3$
1	$1,82 \cdot 10^3$
10	$5,75 \cdot 10^3$
100	$1,82 \cdot 10^4$

В цій таблиці для визначеності розглянуто зміну тиску в крові при дії ультразвукових хвиль, враховуючи, що швидкість звуку в крові становить 1575 м/с, а густина — 1050 кг/м³ [15].

За формулою (3) та отриманими значеннями тиску і інтенсивності побудуємо графіки залежностей електричних мембранних потенціалів, котрі враховують активний транспорт іонів K^+ і Na^+ , від перепаду тиску (Рис.1) для мембрани еритроцитів при температурі середовища $T_i = 293$ К. Для цього об'єкту маємо [8]: $[K]_i = 139$ ммоль/л і $[Na]_i = 19$ ммоль/л —

концентрації іонів K^+ і Na^+ усередині клітини; $[K]_e=5$ ммоль/л і $[Na]_e=155$ ммоль/л — концентрації цих іонів у зовнішньому розчині. Щодо відношення проникностей P_K/P_{Na} , то будемо вважати його рівним $P_K/P_{Na}=1/0,04$ [15].

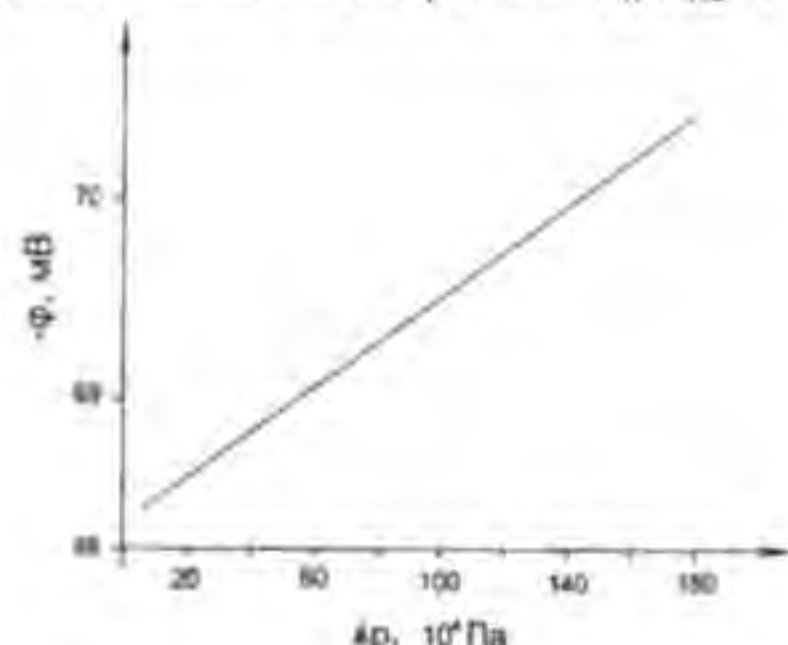


Рис. 1.

Залежність значення мембранного потенціалу з урахуванням активного транспорту від перепаду тиску

Таким чином, отримані теоретичні результати дають важливі як кількісні, так якісні оцінки впливу бародифузійних процесів на мембранні потенціали спокою при активному транспорті. Зокрема, один з теоретичних висновків полягає в тому, що підвищення тиску, спричинене дією ультразвукової хвилі, приводить до зростання мембранного потенціалу спокою при активному транспорті. Слід зазначити, що експериментальним підтвердженням цього висновку є наведені в [1] дані щодо збільшення градієнту концентрації на плазматичних мембранах клітин під дією ультразвуку. Оскільки за активний транспорт у клітинній мембрані відповідають транспортні білки АТФази, то зміна їх активності безпосередньо пов'язана з зміною мембранного потенціалу.

ДІЯ УЛЬТРАЗВУКУ НА АКТИВНИЙ ТРАНСПОРТ

З метою визначення впливу бародифузійних явищ на мембранні механізми іонного транспорту було проведено експериментальне дослідження дії низькоінтенсивного ультразвукового випромінювання на активність інтегрального мембранного білка — Na^+, K^+ -АТФази. Натрій-калієвий насос працює за умови спряження двох процесів — активного транспорту іонів Na^+ і K^+ та гідролізу молекул АТФ, енергія розпаду яких йде на забезпечення процесу фосфорилування транспортного білка АТФази. Активність Na^+, K^+ -АТФази можна оцінити за кількістю іонів неорганічного фосфору, який виділяється за 1с при дефосфорилізації 1г білка [11,15].

Експериментальним об'єктом для вивчення структури і властивостей інтегральних білків були мембрани еритроцитів, які порівняно легко отримати в чистому вигляді, оскільки еритроцити не містять внутрішніх мембран. При вивченні дії

ультразвуку на активність АТФази, 100 білих безпородних статевозрілих щурів масою $m=180-200$ г піддавали впливу ультразвукового випромінювання в області піднебінної дужки двох режимів протягом 10 хв.

Тваринам дослідних груп (по 6-10 щурів) перед озвучуванням видаляли безпечною бритвою волосяний покрив на місці дотику аплікатора, а контактне середовище обробляли дезодоровану вазелінову олію. Джерелом ультразвуку як моночастотного, так і стохастичного режимів був апарат "Тератон-V". У якості джерела моночастотного ультразвуку використовували також прилад УЗТ-3.0413, а для генерації стохастичного ультразвукового сигналу застосовували розроблений І.В.Островським та О. Т. Марченком [17] експериментальний терапевтичний апарат. Частота моночастотного ультразвуку (МУЗ) становила $\nu=0,88$ МГц, а стохастичного (СТУЗ) — змінювалась в діапазоні $\nu=(0,88 \div 2,64)$ МГц. Інтенсивність ультразвуку обох режимів змінювалась в межах від 0,1 до 0,5 Вт/см². Дослідження проводили через 1 год після припинення дії фізичного фактора. Дослідження проводили через 3 год, 24 год та 48 год після дії ультразвуку.

Результати досліджень активності Na^+, K^+ -АТФази мембран еритроцитів, наведені в Таблиці 2, свідчать про те, що під впливом стохастичного ультразвуку з інтенсивностями $I=0,12$ Вт/см² та $I=0,25$ Вт/см² відбувалось збільшення активності транспортного білка на 35 та 60 ($p<0,05$) % відповідно.

Таблиця 2. Na^+, K^+ -АТФаза активність мембран еритроцитів при впливі ультразвуку

Активність АТФази, 10 ⁻³ моль/г			
Ціла АТФаза	Інтенсивність, Вт/см ²		
Зональна АТФаза	$\nu=0,88 \div 2,64$ МГц		
Na^+, K^+ -АТФаза	240 ⁰ ± 100 ⁰		
Діапазон ІУЗ (10 ⁻³ моль/г)	$I=0,12$ Вт/см ²	$I=0,25$ Вт/см ²	$I=0,5$ Вт/см ²
0,88 ± 0,15 МГц	12,7 ± 0,80	14,7 ± 0,80	12,0 ± 0,14
Na^+, K^+ -АТФаза	2,80 ± 0,00	3,80 ± 0,02	4,12 ± 0,02
Діапазон ІУЗ (10 ⁻³ моль/г)	$I=0,12$ Вт/см ²	$I=0,25$ Вт/см ²	$I=0,5$ Вт/см ²
0,88 ± 0,15 МГц	11,7 ± 0,11	11,12 ± 0,11	11,20 ± 0,11
Na^+, K^+ -АТФаза	1,00 ± 0,00	1,20 ± 0,01	2,12 ± 0,01

При застосуванні моночастотного ультразвуку з інтенсивностями $I=0,1$ Вт/см² і $I=0,3$ Вт/см² спостерігалось підвищення активності Na^+, K^+ -АТФази на 46 і 62 % ($p<0,05$) відповідно. Під впливом стохастичного ультразвуку з інтенсивністю $I=0,5$ Вт/см² спостерігалось зниження активності ферменту відносно контролю на 32 % ($p<0,05$), тоді як моночастотний ультразвук такої ж інтенсивності приводив до зменшення активності Na^+, K^+ -АТФази на 45 % ($p<0,05$) (Рис.2).

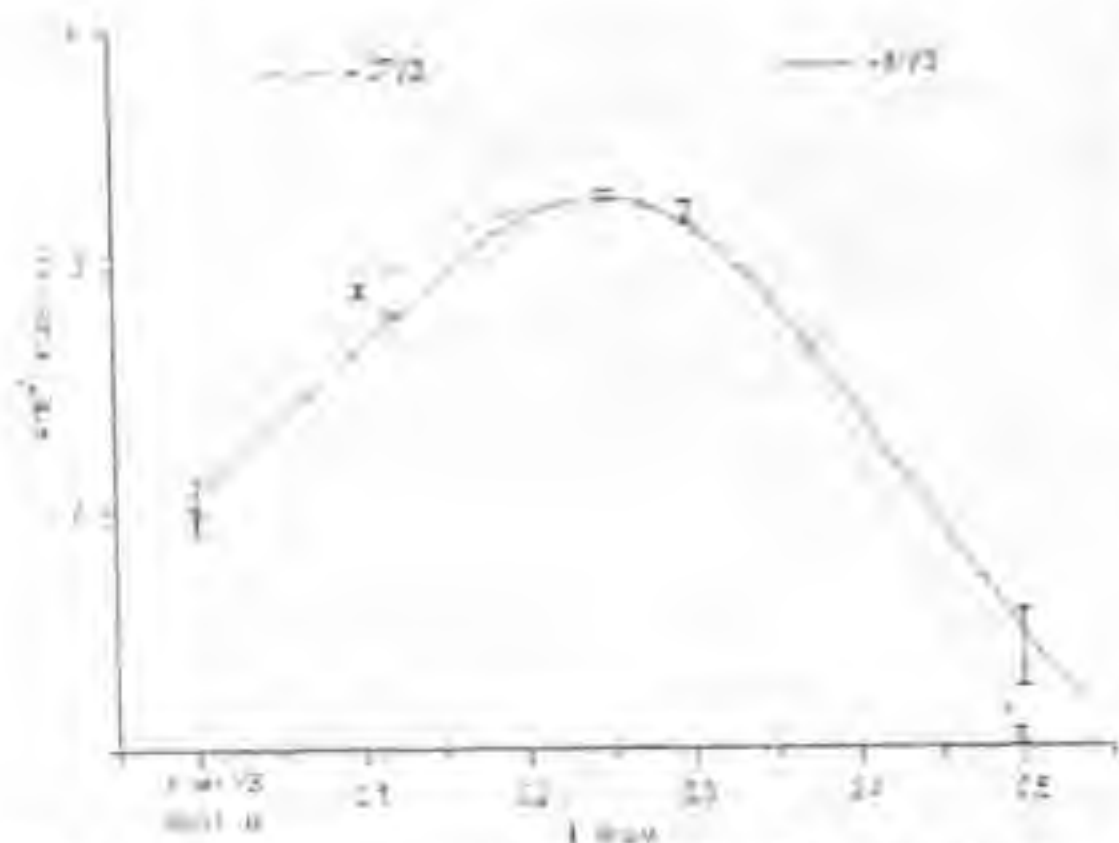


Рис.2. Зміна активності Na^+, K^+ -АТФази під дією стохастичного (СТУЗ) та моно частотного (МУЗ)

Таким чином, біологічна дія як стохастичного, так і моночастотного ультразвукового сигналу залежить від його інтенсивності і від зміни тиску в біологічному середовищі клітини. В області інтенсивностей $I=0,1-0,3 \text{ Вт/см}^2$ ультразвук обох режимів проявляє таку біологічну дію, яка зумовлює підвищення активності АТФази. В результаті збільшення активності Na^+, K^+ -АТФази відбувається зміна концентрації іонів у зовнішньому (додається 3 іони Na^+ і виходить 2 іони K^+) та внутрішньому (виходить 3 іони Na^+ і додається 2 іони K^+) середовищах клітини і, як наслідок, збільшення абсолютного значення різниці електричного мембранного потенціалу, який створюється внаслідок різниці концентрацій даних іонів.

Зі збільшенням інтенсивності ультразвукового випромінювання до $I=0,5 \text{ Вт/см}^2$ активність Na^+, K^+ -АТФази зменшується. Можливо, таке відхилення від запропонованої теорії пояснюється тим, що при розрахунках не бралася до уваги анізотропія фізичних властивостей мембранного середовища (див., наприклад, [16]).

Література

- [1] Эльпинер И.Е. Биофизика ультразвука - М.: Наука, 1973, - 327с.
- [2] Rudenko O.V. Nonlinear methods in acoustic diagnostics. // Russian Journal of Nondestructive Testing. - 1993. - v.29. - №8., - P. 583-588.
- [3] О.В. Руденко Нелинейные волны: некоторые биомедицинские приложения // УФН. — Т.177, №4, —2007., - С.374-383.
- [4] L. A. Bulavin, Yu. F. Zabashita, Ultrasonic Diagnostics in Medicine. Physical Foundations // Boston: VSP. - 2007., - 528p.
- [5] Haar ter G. Ultrasonics biophysics/ In: Hill C.R. ed. *Physical principles of medical ultrasonics*// Chchester: Ellis Harwood Limited, -1986,— P.378-435.
- [6] Haar ter G. Ultrasound focal bean surgery // Ultrasound Med. Biol. - 1995. - V. 21. - P.1089-1100.
- [7] Nyborg W.L. Biological effects of ultrasound: development of safety guidelines. Part II: General review //Ultrasound Med. Biol. — 2001. — V. 27. —N 3.—P.301-333.
- [8] Костюк П.Г., Зима В.Л., Магура И.С., Мірошніченко М.С., Шуба М.Ф. Біофізика.- К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2008. —567с.
- [9] Ремизов А.Н. Медицинская и биологическая физика - М.: Высшая школа., - 1996., - 608с.
- [10] Медична і біологічна фізика (за редакцією Чалого О.В.) - К., —2005, —760с.
- [11] Bruce Alberts, et al. Molecular Biology Of The Cell. — 5th ed. — New York: Garland Science, 2007., - 1616p.
- [12] Чалый О.В., Шліхта Г.В. Електричні мембранні потенціали спокою з урахуванням бародифузійних явищ// УФЖ. - 2007, - Т.52, №9 — С. 915-919.
- [13] Чалый А.В. Неравновесные процессы в физике и биологии - К.: Наукова думка, 1997. - 184с.
- [14] Самко С.П., Чалый О.В. Пассивный ионный транспорт крізь мембранні структури при наявності градієнта температур // Вісник Київського університету, серія фіз.-мат.науки. - 2000. - №1. - С.490-493.
- [15] В.Л. Зима Біофізика: Збірник задач- К.: — Вища школа., —2001., — 124с.
- [16] А.Б. Рубин Термодинамика биологических процессов// М.: Изд-во МГУ, - 1976, — 239 с.
- [17] Ostrovskiy I.V., Marchenko A.T. Ultrasonic instrument for information action on biological objects and tissues // J. Ultrasound Med. - 1992. — V. 11. -N3. — P.57-64.

Надійшла до редколегії 09.09.2010

Підп. до друку 01.11.2010 р.
Формат 70x100¹/₁₆.
Ум. друк. арк. 22,73. Наклад 350.
Зам. 279.

ДП «Інформаційно-аналітичне агентство»
вул. Еспланадна 4–6, м. Київ, 01601, Україна
тел/факс 287-03-79, 289-77-62
E-mail: iaa@dstati.kiev.ua

